УДК 533 6.011

Высокоскоростная поступательная неравновесность ударно сжатой смеси газов с бимодальным распределением частиц

М.М. Кузнецов[1,2] *, С.В. Матвеев*[2]*, Е.В. Молоствин*[2]*, Ю.Г. Решетникова*[2]*, Л.В. Смотрова*[2]

[1] Московский физико-технический институт (государственный университет)

[2] Московский государственный областной университет

E-mail: kuznets-omn@yandex.ru

Аналитически исследованы необходимые и достаточные условия эффекта высокоскоростной поступательной неравновесности в ударно сжатой смеси газов с бимодальным распределением скоростей молекул (атомов) компонентов смеси. Эффект высокоскоростной поступательной неравновесности в ударно сжатой смеси газов был установлен ранее в численных исследованиях структуры ударных волн методом статистического моделирования Монте-Карло [1]. Аналитическая модель ударного сжатия смеси газов с бимодальным распределением Тамма- Мотт-Смита тепловых скоростей компонентов смеси позволяет установить (в рамках справедливости этой модели) необходимые и достаточные условия данного эффекта. По сравнению с аналогичным результатом, установленным авторами ранее [2] для эффекта высокоскоростной поступательной неравновесности в ударно сжатых простых газах, применение бимодального распределения по тепловым скоростям компонентов смеси потребовало преодоления ряда принципиальных трудностей, связанных с выполнением законов сохранения массы, импульса и энергии внутри фронта ударной волны.

Исследование поступательной неравновесности в ударных волнах, проведенное к настоящему времени показало, что для однокомпонентного газа она должна быть незначительной. Так, в работе [3] было проведено сравнение результатов вычисления функции распределения пар молекул по относительным скоростям, полученных с использованием методов Монте-Карло и Мотт-Смита. Результаты вычислений практически совпали в широком диапазоне чисел Маха набегающего потока вплоть до M_0 = 0. Однако существенного влияния поступательной неравновесности не было обнаружено.

Анализируя величину относительного превышения концентрации пар энергетически активных молекул над соответствующей концентрацией в поступательно равновесной зоне за ударной волной, полученную в работе [3], можно показать, что она имеет максимум при величине относительной скорости молекул, равной удвоенной разности среднемассовых скоростей газа перед фронтом ударной волны и за ним. Этот максимум асимптотически при числе Маха набегающего потока стремящегося к бесконечности ($M_\infty \to \infty$) и отношении плотностей в ударной волне стремящемся к нулю, $\varepsilon = \dfrac{\rho_\infty}{\rho_s} \to 0$ приближенно равен

$$F(\varepsilon, x) = (1-\nu_\alpha)^2 + \frac{\varepsilon\nu_\alpha}{\sqrt{2}}(1-\nu_\alpha)\exp(\frac{1}{2\varepsilon}) \ , \qquad (1)$$

Здесь $\nu_\alpha = [1 + \exp(x / \Delta)]^{-1}$ – решение Мотт-Смита для концентрации молекул n в ударной волне ($n = n_0[\nu_\alpha + (1 - \nu_\alpha)\varepsilon^{-1}]$, n_0 – концентрация частиц в набегающем потоке), x,Δ соответственно координата и толщина ударной волны [4].

Из соотношения (1) следует, что максимум отношения функции распределения пар молекул в ударной волне к аналогичной равновесной функции за ее фронтом определяется только двумя параметрами: степенью сжатия в волне ε^{-1} и значением переменной координаты x.

Численные значения функции $F(\varepsilon,x)$ сильно, нелинейным образом зависят от параметра ε. Так при $\varepsilon = \dfrac{1}{16}$ они сравнимы с единицей, а при $\varepsilon = \dfrac{1}{25}$ величина F равна 150 .

Аналогичное рассмотрение, проведенное нами для смеси газов с сильно различающимися по массе компонентами, что и соответствует типичному составу сажеобразующей смеси в ударных волнах ($\dfrac{m_\beta}{m_\alpha} = 10-100$, $\dfrac{n_\beta}{n_\alpha} = 1-0{,}1$ %) показало, что функция F зависит уже от трех параметров: ε, x, $\varepsilon_\alpha = \dfrac{m_\alpha}{m_\beta}$. С учетом малости параметров M_∞^{-1} , ε, ε_α эта функция может быть представлена аналитически в следующем виде:

$$F(\varepsilon, \varepsilon_\alpha, x) \cong \varepsilon\varepsilon_\alpha \exp(\frac{1}{2\varepsilon\varepsilon_\alpha}) \ , \qquad (2)$$

Численные значения величины (2) при ε = ¼ (одноатомный газ), $\varepsilon_\alpha = \dfrac{m_\alpha}{m_\beta} = 0{,}2 \ и \ 0{,}1$ соответственно равны:

F(¼; 0,2; $\dfrac{x}{\Delta} \to \infty$) = $5{,}5 \cdot 10^3$

F(¼; 0,2; $\dfrac{x}{\Delta} \to \infty$) = $1{,}2 \cdot 10^8$

Из формулы (2) видно, что величины F(ε; ε_α; x) являются сильной нелинейной функцией двух параметров ε и ε_α.

Можно показать, что скорость поступательно-неравновесного пиролиза R_u, вычисляемая статистически на основе Мотт-Смитовской функции распределения пар имеет следующий вид:

$$R_u(\varepsilon, \varepsilon_\alpha, \theta_d, x) = R_A \exp[(2\sqrt{2\varepsilon\theta_d} - \bar{u})\bar{u}(2\varepsilon)^{-1}] \qquad (3)$$

здесь R_A – равновесная, аррениусовская скорость пиролиза за ударной волной, $\theta_d = E_d / kT_S$, k – константа Больцмана, T_S – температура за ударной волной, $\bar{u} = u / u_\infty$, u – относительная скорость легкой (α) и тяжелой (β) компонент смеси в ударной волне, u_∞ – скорость смеси в набегающем потоке, перед ударной волной ($x \to -\infty$), u – является функцией двух параметров x и ε_α, $u = u(x, \varepsilon_\alpha)$.

Численная величина отношения $\bar{R}$ скорости неравновесного пиролиза R_u к равновесному R_A определялись для типичных значений параметра θ_d в сажеобразующих реакциях θ_d = 10 – 30. При этом было получено:

$\bar{R}$ (¼; 0,1; 10; $\dfrac{x}{\Delta} \to \infty$) = $5{,}5 \cdot 10^3$

$\bar{R}$ (¼; 0,1; 20; $\dfrac{x}{\Delta} \to \infty$) = $5{,}5 \cdot 10^3$ (4)

$\bar{R}$ (¼; 0,1; 30; $\dfrac{x}{\Delta} \to \infty$) = $1{,}2 \cdot 10^8$

Как следует из оценок (4) величина $\bar{R}$ сильно нелинейным образом зависит от значений энергетического параметра θ_d.

Необходимые и достаточные условия высокоскоростной поступательной неравновесности, установленные ранее для простого газа с бимодальным распределением в ударной волне [2], допускают обобщение на случай бинарной смеси газов, с различными, в общем случае, концентрациями n_γ и массами m_γ молекул $(\gamma = \alpha, \beta)$. Для этого бимодальное распределение $F(b,c)$,записанное для каждого сорта молекул γ ,следует представить в следующем виде

$$F^{(\gamma)} = n\chi\eta_0 F_0^{(\gamma)} + n(1-\chi)\eta_1 F_1^{(\gamma)}$$

Здесь $n = \sum_{(\gamma)} n_0^{(\gamma)} + \sum_{(\gamma)} n_1^{(\gamma)}$ $\quad \chi = \sum_{(\gamma)} n_0^{(\gamma)} \big/ n$ $\quad \eta_0^{(\gamma)} = n^{(\gamma)} \Big/ \sum_{(\gamma)} n_0^{\gamma}$ $\quad \eta_1^{(\gamma)} = n^{(\gamma)} \Big/ \sum_{(\gamma)} n_1^{\gamma}$

Функция распределения пар молекул $G^{(\alpha,\beta)}$ может быть записана как и в однокомпонентном (простом) газе в форме полинома второй степени по параметру χ:

$$G^{(\alpha,\beta)} = \chi^2 Q_0^{(\alpha,\beta)} + 2\chi(1-\chi)\left[(Q_{01}^{(\alpha,\beta)} + Q_{10}^{(\alpha,\beta)})\right] + (1-\chi)^2 Q_1^{(\alpha,\beta)}$$

$Q_0^{(\alpha,\beta)} = n^2 \eta_0^{(\alpha)} \eta_0^{(\beta)} G_0^{(\alpha,\beta)}; Q_1^{(\alpha,\beta)} = n^2 \eta_1^{(\alpha)} \eta_1^{(\beta)} G_1^{(\alpha,\beta)}$; $Q_{01}^{(\alpha,\beta)} = (n^2/2)\eta_0^{(\alpha)}\eta_1^{(\beta)} G_{01}^{(\alpha,\beta)}$; $Q_{10}^{(\alpha,\beta)} = (n^2/2)\eta_1^{(\alpha)}\eta_0^{(\beta)} G_{10}^{(\alpha,\beta)}$

Функции $G_0^{(\alpha,\beta)}$, $G_1^{(\alpha,\beta)}$, $G_{01}^{(\alpha,\beta)}$, $G_{10}^{(\alpha,\beta)}$ совпадают в простом газе с функциями G_0, G_1 ,G_{01},G_{10} при $\alpha = \beta$.

Это выражение позволяет исследовать на экстремум (максимум) функцию пар молекул, отнесенную к поступательно равновесному значению этой функции за ударной волной

$$\tilde{G}^{(\alpha,\beta)} = G^{(\alpha,\beta)} \Big/ G_1^{(\alpha,\beta)}$$

ЛИТЕРАТУРА

1. *Генич А.П., Куликов С.В., Манелис Г.Б., Черешнев С.Л.* Распределение молекулярных скоростей во фронте ударной волны в газовых смесях. // Изв. АН СССР, Механика жидкости и газа – 1990. – №2. – С. 144-150.

2. *M. M. Kuznetsov, Yu. D. Kuleshova.* Increase in rates of Kinetic Prosesses inside the Bimodal Hypersonic Shock Wave. // HeatTransRes. – 2012. – v43. – i3. – pp. 228-236.

3. *Mott-Smith H.M.* The solution of the Boltzmann equation for a shock wave. // Phys. Rev. A, 1951, v.82, p.885-892.

4. *Куликов С.В., Терновая О.Н., Черешнев С.Л.* Специфика поступательной неравновесности во фронте ударной волны в однокомпонентном газе // Химическая физика. – 1993. – Т.12, №3. – С. 340-342.