

01;03

## Численное исследование поступательной неравновесности за фронтом ударной волны

© А.Ю. Сазонов, Н.В. Шуть

Московский физико-технический институт,  
140180 Жуковский, Московская область, Россия  
e-mail: wtdiv@tsagi.rssi.ru

(Поступило в Редакцию 2 октября 2002 г. В окончательной редакции 18 ноября 2003 г.)

Рассматривается зона поступательной неравновесности в ударной волне для газа, состоящего из легких частиц и малой примеси тяжелых частиц. Газ рассматривается в приближении двумерности и отсутствия дальнедействующих сил. В рамках этого приближения была составлена программа численного расчета молекулярной динамики исследуемого газа. С ее помощью рассчитана функция распределения частиц в ударной волне, проведен анализ эволюции функции распределения по времени, а также влияние на нее состава газа.

### Введение

Известно, что плоскую ударную волну (УВ) в газе можно разделить на несколько характерных областей: самая первая — область, в которой происходит трансформация функции распределения молекул по скоростям, так называемая зона поступательной неравновесности. Затем следуют зоны возбуждения вращательных и колебательных степеней свободы, зоны диссоциации, химических реакций и ионизации. В конце устанавливается термодинамическое равновесие. В данной работе основное внимание уделено первой области, поскольку именно в зоне поступательной неравновесности происходит зарождение всех последующих процессов и именно она оказывает на них наиболее значительное влияние. Возникающие в зоне поступательной неравновесности высокоэнергетические частицы могут сильно изменить последующие процессы в области УВ. В литературе известны экспериментальные данные [1,2], подтверждающие возможность осуществления химических и ядерных реакций со значениями пороговой энергии, значительно превышающими характерную энергию равновесного состояния. Влияние эффектов поступательной неравновесности за фронтом УВ было рассмотрено в работе [1] на примере легкого газа с содержанием присадки от 0.1 до 3.0% молекул йода, при этом были получены кратковременные пики неравновесного излучения, многократно превышающие значения, имеющие место при равновесной поступательной температуре. Известны случаи нежелательного воздействия высокоэнергетических частиц на физические процессы, например на теплопередачу при сверхзвуковом полете самолета в облаках, в сверхзвуковых и гиперзвуковых аэродинамических трубах, когда выросшие в сопле кластеры или пылинки изменяют взаимодействие частиц в ударной волне перед телом. Таким образом, следует уделить особое внимание процессу возникновения высокоэнергетических частиц в смеси легкого и тяжелого газов. Существующие в настоящее время экспериментальные методы исследо-

вания неравновесных эффектов за фронтом УВ основаны в основном на определении спектра и измерении интенсивности излучения возбуждающих молекул газа и не дают информации о процессах, предшествовавших возникновению излучающих состояний [1]. В то же время с помощью численного моделирования возможно непосредственно получить неравновесную функцию распределения (ФР) молекул по скоростям и проследить ее эволюцию.

Целью данной работы является исследование на примере численной модели механизмов возникновения поступательной неравновесности за фронтом УВ в идеальном газе при наличии примеси тяжелых атомов (например, присадки атомов К, Cs, используемой в магнитогазодинамических (МГД) системах с легким рабочим газом — He). В результате проведенного исследования подтверждено наличие высокоэнергетических соударений в области поступательной неравновесности УВ и показана динамика процесса установления термодинамического равновесия.

### Постановка задачи

Моделирование структуры УВ было основано на рассмотрении торможения высокоскоростного газового потока в скачке уплотнения. При этом начальная скорость потока соответствовала числу  $M = 8-10$ , что имеет место в большинстве современных гиперзвуковых аэродинамических труб. Скорость газового потока при этом в 8–10 раз превышает скорость теплового движения молекул. Газ принимался идеальным, т.е. отсутствовали диссоциации, силы дальнего действия между молекулами, колебательные и вращательные степени свободы. На расстояниях порядка нескольких длин свободного пробега за фронтом УВ, там, где формируется новая ФР, такое предположение представляется вполне допустимым, поскольку колебательные, вращательные и электронные уровни еще не возбуждены. На больших расстояниях от

фронта УВ в рамках данного приближения также возможно получить определенную качественную картину ФР, так как поступательные степени свободы продолжают оказывать на ее формирование существенное влияние. Наиболее ярко эффекты, связанные с поступательной неравновесностью, должны проявляться в газодинамических потоках, содержащих примесь, существенно отличающуюся по массе от основного газа. В этом случае при торможении (ускорении) потока происходит перераспределение кинетической энергии между тяжелым и легким компонентами и ФР некоторое время остается существенно неравновесной. В численных экспериментах, описанных в данной работе, концентрация тяжелых атомов (например, присадки цезия) принимается равной от 0.3 до 3%, что имеет место в МГД установках. Отношение масс легкого и тяжелого компонентов варьировалось от 1/34 (He + Cs) до 1/127 (H<sub>2</sub> + I<sub>2</sub>). Следует заметить, что разница масс на 2 порядка и более может реализовываться в аэродинамических трубах с дуговым подогревателем, когда в результате эрозии электродов в поток попадают пары металла и образуются кластеры, состоящие из 100 и более атомов.

## Об алгоритме расчета

Для исследования возникающего неравновесного распределения была разработана программа по моделированию упругих столкновений потоков частиц. Тепловое движение частиц в потоках и в зоне взаимодействия рассчитывалось в приближении идеального газа, состоящего из абсолютно гладких и упругих шаров определенного радиуса. Хотя данная модель является весьма упрощенной и не описывает многих событий, имеющих место в высокотемпературном газе, нет оснований считать, что она не может выявить качественной картины процесса. При проведении предварительных проверочных расчетов были экспериментально получены закон равновесного распределения молекул по скоростям и основное уравнение молекулярно-кинетической теории газа (закон Клапейрона–Менделеева). Между тем движение шаров-молекул при этих расчетах определялось по законам механики Ньютона и не было изначально связано с какими-либо статистическими законами.

Существующая в настоящее время программа описывает идеальный газ на плоскости, частицы которого двигаются в координатах  $X, Y$ . Данное ограничение не является принципиальным и в дальнейшем предполагается использовать, более реальную трехмерную модель.

Движение частиц, составляющих идеальный газ, сводится к поступательному движению и к столкновениям частиц между собой, каждая частица описывается с помощью постоянно изменяющихся координат  $X, Y$  и компонент скорости  $V_x, V_y$ . Кроме того, каждой частице соответствуют фиксированные масса  $m$  и радиус  $R$ . В отличие от реального газа в компьютерной модели каждую

молекулу можно пометить, присвоив ей индивидуальный номер  $n$ .

Перемещение каждой частицы за время  $\Delta t$  описывается известными формулами механики:

$$x_n = x_{n0} + V_x \Delta t,$$

$$y_n = y_{n0} + V_y \Delta t.$$

Наиболее сложным для расчетов является случай столкновения двух атомов, имеющих различные массы, но и он выводится из законов сохранения механической энергии и импульса. При столкновении частиц  $n$  и  $m$  новые скорости будут определяться по формулам

$$\Delta V = \frac{(x_m - x_n)(U_m - U_n) - (y_m - y_n)(V_m - V_n)}{4(r_m + r_n)^2},$$

$$U'_n = U_n + \frac{2m_m}{m_m + m_n} \Delta V (x_m - x_n),$$

$$U'_m = U_m + \frac{2m_n}{m_m + m_n} \Delta V (x_m - x_n),$$

$$V'_n = V_n + \frac{2m_m}{m_m + m_n} \Delta V (y_m - y_n),$$

$$V'_m = V_m + \frac{2m_n}{m_m + m_n} \Delta V (y_m - y_n).$$

Также в алгоритм были включены столкновения со стенками, которые являются естественной защитой от неограниченного увеличения координат отдельных частиц. При взаимодействии с вертикальной или горизонтальной стенкой соответствующие проекции скорости просто меняют свой знак (зеркальное отражение).

В целом схема расчетов представляет собой оптимизированный с учетом специфики решаемой задачи алгоритм, предложенный Виленкиным в работе [3]. Программа, составленная на основе этого алгоритма, позволяет проводить численные эксперименты с общим числом частиц порядка  $10^5$ , рассчитывая при этом в среднем 1000 парных столкновений в секунду на машине с процессором Pentium II.

## Результаты численного моделирования

Наиболее сильно эффекты, связанные с появлением высокоэнергетических частиц, должны, по-видимому, проявляться при столкновении двух встречных потоков. Для моделирования взаимодействия двух потоков частиц была использована описанная выше программа по расчету идеального газа. Начальные положения частиц задавались так, что они образовывали две области с равномерным заполнением. Скорости частиц в каждой области выбирались равными по модулю и противоположными по направлению. Затем на скорости каждой частицы накладывались возмущения (примерно 10%), соответствующие равновесному распределению. Таким образом, получалось два потока частиц с максвелловским распределением, летящих навстречу друг другу

со скоростями, соответствующими гиперзвуку с числом  $M \sim 10$  (что характерно для современных гиперзвуковых аэродинамических труб). В ряде экспериментов масса и размер определенного числа частиц (0.1 – 3% от общего числа) задавались отличными от остальных, что соответствовало введению в поток присадки из тяжелых атомов.

В области взаимодействия встречных потоков, содержащих частицы с разными массами, скорость легких частиц может увеличиваться в несколько раз в результате переотражения их от тяжелых. Другими словами, тяжелые атомы могут играть роль движущегося с высокой скоростью поршня, сжимающего прослойку из легких атомов и передающего им свою кинетическую энергию (рис. 1).

Для подтверждения данного предположения были проведены два численных эксперимента. В первом определялась функция распределения частиц по скоростям в области взаимодействия двух потоков (рис. 2, 3). Во втором также определялась ФР, но в оба потока было добавлено по 2% частиц с массой, в 34 раза

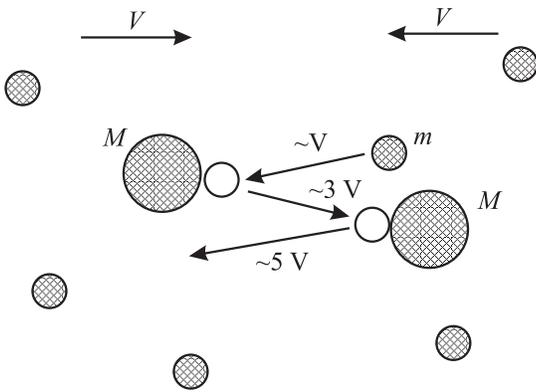


Рис. 1. Схема взаимодействия встречных потоков.

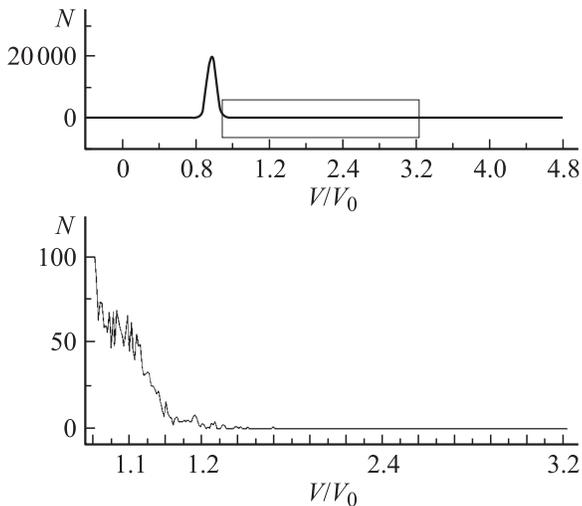


Рис. 2. Зависимость количества легких частиц от их абсолютной скорости.

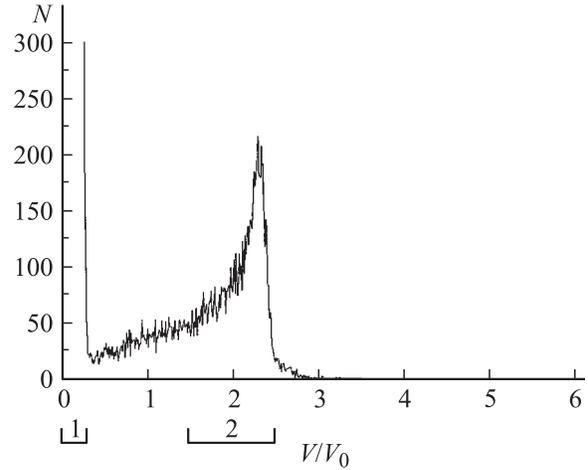


Рис. 3. Зависимость количества легких частиц от их скорости относительно потока.

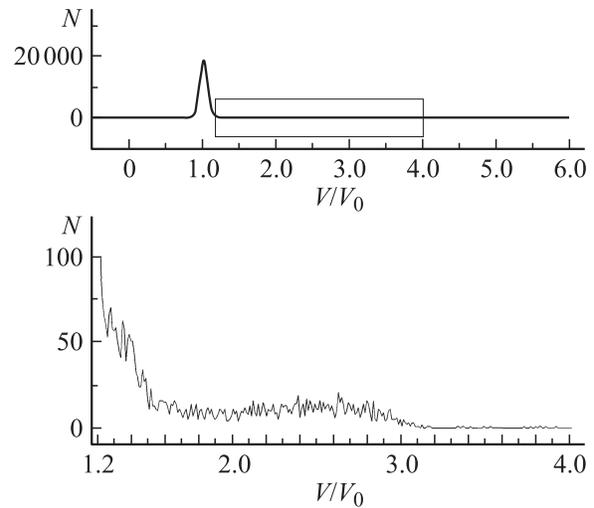
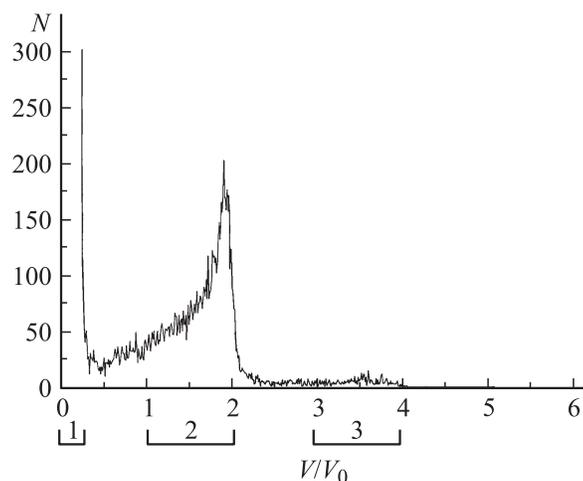


Рис. 4. Зависимость количества легких частиц от их абсолютной скорости при наличии примеси 2% тяжелых атомов.

большой, чем у остальных. Скорости потоков во втором случае были соответственно уменьшены, чтобы сохранить кинетическую энергию такой, как и в первом опыте (рис. 4, 5). Диаграммы распределения числа частиц ( $N$ ) по скоростям относительно потока ( $V/V_0$ ), представленные на рис. 3 и 5, можно условно поделить на несколько характерных интервалов: 1) распределение частиц по скоростям в невозмущенном потоке (до столкновения со встречным потоком), скорость потока во втором случае примерно на 16% меньше, чтобы полная кинетическая энергия потока осталась прежней, ФР соответствует максвелловскому распределению со средней тепловой скоростью примерно  $0.1V_0$ , где  $V_0$  — начальная скорость потока; 2) распределение частиц в зоне взаимодействия встречных потоков; отчетливо виден характерный максимум функции в районе удвоенной скорости потока, обусловленный столкновениями летящих навстречу легких



**Рис. 5.** Зависимость количества легких частиц от их относительной скорости при наличии примеси 2% тяжелых атомов.

частиц; 3) эта зона присутствует только на последнем рисунке, поскольку она обусловлена соударениями тяжелых атомов с легкими, для нее характерны скорости порядка  $3V_0-4V_0$  (соответствует четырехкратному увеличению скорости частиц относительно потока, разброс скоростей происходит вследствие теплового движения частиц в потоке, а также из-за того, что не все соударения являются фронтальными).

Очевидно, что для получения большого количества высокоэнергетических частиц в МГД ускорителях и других подобных устройствах выгоднее увеличивать концентрацию присадки тяжелых элементов, чем увеличивать скорость потока, тем более, что на практике повышение скорости потока сопряжено с рядом технических сложностей.

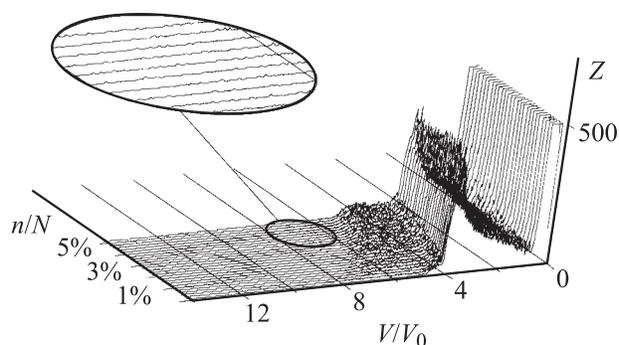
Для определения оптимального количества тяжелых частиц был проведен программный расчет, в котором отношение масс частиц в потоке оставалось постоянным, а количество тяжелых частиц и скорость потока менялись таким образом, что полная энергия потока оставалась постоянной. Изменение количества частиц производилось в диапазоне от 0.0 до 5.0% (рис. 6).

На рис. 6 представлена эволюция функции распределения для изменения количества тяжелых частиц, для удобства анализа здесь представлены нижние части ФР. По оси  $X$  отложена скорость, по оси  $Y$  — число тяжелых частиц в процентах, а по  $Z$  — общее число частиц с данной скоростью. Множество пиков на рис. 6 вызвано малым количеством частиц в экспериментальном газе. Как видно из графиков, максимальное количество быстрых частиц легкого газа мы получаем, когда число тяжелых частиц находится в районе 1.0–1.5%. Однако следует заметить увеличение числа сверхбыстрых частиц (возникновение которых связано с многократными переотражениями легких частиц от тяжелых) в районе 3.0–4.5%. Можно предположить, что увеличение полного числа частиц (в данном эксперименте использовалось

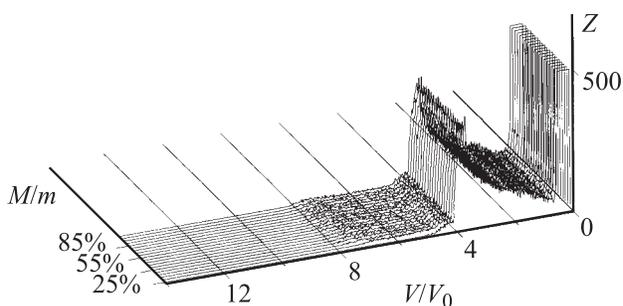
$3 \cdot 10^5$  частиц) приведет к росту числа сверхбыстрых частиц. В этом случае выбор между этими областями будет определяться согласно задаче.

Если проделать то же самое, варьируя массу, а число тяжелых частиц оставить постоянным, то полученную информацию сложно будет анализировать. Для облегчения анализа был проделан аналогичный расчет, за исключением того, что увеличение массы не компенсировалось уменьшением скорости и полная энергия менялась пропорционально изменению массы. В этом эксперименте наблюдались малый рост числа быстрых, неравновесных частиц и небольшой начальный прирост в максимальной скорости, которая затем выходит на постоянный уровень (рис. 7). Вдоль оси  $Z$  в данном случае показано изменение отношения масс тяжелых и легких частиц  $M/m$ , где  $M$  — масса тяжелой частицы,  $m$  — соответственно легких.

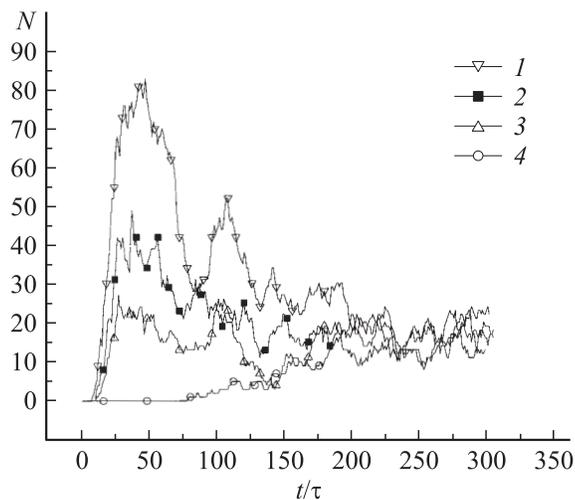
Определенный интерес представляет также определение эволюции ФР и изменения количества высокоэнергетических частиц во времени. Для этой цели был проведен численный эксперимент подобный описанному выше. Два кратковременных пучка двумерного, идеального газа, каждый из которых содержит по 150 000 частиц с разной массой, двигались навстречу друг другу со скоростями, соответствовавшими числу  $M = 10$ . После начала взаимодействия газовых пучков, которое определялось по характерному изменению их ФР, и до момента, когда они практически полностью затормаживались, превратив-



**Рис. 6.** Влияние массовой концентрации тяжелых частиц на вид функции распределения легких частиц.



**Рис. 7.** Влияние массы тяжелых частиц на вид функции распределения легких частиц.



**Рис. 8.** Изменение количества высокоэнергетических частиц по времени. Отношение масс — 34, относительная концентрация тяжелых частиц: 1 — 2, 2 — 1, 3 — 0.5%, 4 — 0.

шись в размытое облачко высокотемпературного газа, определялось количество высокоэнергетических частиц легкого газа. Под высокоэнергетическими частицами понимались частицы с энергией, в 10 раз большей, чем средняя кинетическая энергия, приходящаяся на одну частицу. На рис. 8 представлены результаты этого эксперимента в зависимости от концентрации тяжелых атомов.

При наличии тяжелых частиц на начальной стадии столкновения потоков образуется ярко выраженный пик, соответствующий увеличению количества высокоэнергетических легких частиц. При этом число таких частиц вначале резко возрастает в результате встречных столкновений с тяжелыми атомами, а затем за время порядка 4–5 времен свободного пробега в невозмущенном потоке  $\tau_0$  убывает в результате установления теплового равновесия. Через время порядка 10–12 $\tau_0$  в зоне взаимодействия устанавливается квазиравновесное состояние и количество высокоэнергетических частиц перестает снижаться, выходя на постоянный уровень.

При отсутствии тяжелых атомов начальный пик не наблюдается и количество высокоэнергетических частиц постепенно увеличивается до уровня, соответствующего тепловому равновесию (10–20 частиц). Число частиц с энергией в 10 раз больше средней кинетической, вычисленное по формуле равновесного распределения

$$N = \frac{N_0}{\bar{w}} \int_{10\bar{w}}^{\infty} \exp\left(-\frac{w}{\bar{w}}\right) dw,$$

где  $w$ ,  $\bar{w}$  — кинетическая и средняя кинетическая энергии, равно 14. Таким образом, максимальное количество высокоэнергетических частиц наблюдалось при максимальной концентрации тяжелых атомов (2%) и превышало аналогичный параметр в равновесном состоянии в 5 раз.

## Выводы

1. В результате проведенных численных исследований в УВ ( $M \sim 10$ ) в смеси легкого и тяжелого газов выявлена динамика и специфика рождения высокоэнергетических частиц, энергии которых в 10 и более раз превышают значения, характерные для равновесной поступательной температуры.

2. Обнаружено, что при увеличении концентрации тяжелых частиц растет число высокоэнергетических частиц в области, где скорость соударений превышает скорость потока в 3–4 раза. При дальнейшем увеличении числа тяжелых частиц появляются частицы, скорости которых в 4–5 больше значений, имеющих место при равновесной поступательной температуре.

3. При увеличении массы тяжелых частиц наблюдались малый рост числа быстрых, неровновесных частиц и небольшой начальный прирост в максимальной скорости, которая затем выходит на полочку.

4. Характерно существование кратковременного пика высокоэнергетических частиц в начальный момент столкновения двух пучков, содержащих смесь легкого и тяжелого газов, и его дальнейший спад, обусловленный установлением термодинамического равновесия (рис. 8).

5. Существование в ударной волне области с высокоэнергетическими частицами может быть использовано для реализации химических и, возможно, ядерных реакций в газовых потоках с энергиями, значительно меньшими, чем это необходимо для их инициирования.

Авторы выражают благодарность за помощь, оказанную в ходе исследовательской работы, а также за ценные замечания при подготовке текста статьи В.И. Алферову.

## Список литературы

- [1] *Великодный В.Ю., Емельянов А.В., Еремин А.В.* // ЖТФ. 1999. Т. 69. Вып. 10. С. 23–33.
- [2] *Beuhler R.J., Friedlander G., Friedman L.* // Phys. Rev. Lett. 1989. Vol. 63. P. 1292.
- [3] *Виленкин А.Н., Коткин Г.Л.* // Квант. 1989. Т. 6. С. 3–7.