

УДК 533.72

© 2003 г. В. С. Галкин, С. В. Русаков

**БАРНЕТТОВЫ МОДЕЛИ СТРУКТУРЫ СИЛЬНОЙ УДАРНОЙ ВОЛНЫ
В БИНАРНОЙ СМЕСИ ОДНОАТОМНЫХ ГАЗОВ**

Исследуются вопросы применимости полной и модифицированных систем уравнений Барнетта для задачи о структуре сильной ударной волны в бинарной смеси одноатомных газов. Результаты расчетов методом установления сравниваются с результатами расчетов на основе уравнений Навье–Стокса и методом прямого статистического моделирования. Используются предельные законы межмолекулярного взаимодействия (максвелловские молекулы и молекулы – упругие сферы).

Модели структуры ударной волны и гиперзвукового обтекания, основанные на уравнениях Барнетта (УБ), широко применяются [1–6]. Для подавления так называемой коротковолновой неустойчивости вводились дополнительные демпфирующие слагаемые [1, 4, 5], повышающие, однако, порядок системы уравнений и их громоздкость. Оказалось [2, 3], что избавиться от известных “дефектов” УБ при достаточной точности можно путем их упрощений и модификаций. Для приложений наиболее интересны высокотемпературные течения смесей газов [6]. Описанный ранее подход [2, 3] распространяется ниже на бинарную смесь газов; УБ применялись для этого случая только к некоторым линейным задачам [7, 8]. Недавно дан вывод УБ для многокомпонентной смеси многоатомных газов [9, 10], получены необходимые “рабочие” выражения для барнеттовых коэффициентов переноса бинарной смеси одноатомных газов [10].

Основная цель – продолжение исследования математических свойств, точности и пределов применимости модификаций системы УБ. “Дефекты” последней состоят не только в неопределенности с постановкой граничных условий (из-за ее повышенного порядка) и ее неустойчивости: в рамках уравнений Навье–Стокса доказано [11], что при бесконечно большом числе Маха перед волной M имеется передний фронт ударной волны в газе, на нем терпят разрывы производные, что предъявляет дополнительные требования к численным алгоритмам при больших, но конечных M (качественно это связано с тем, что перед фронтом температура и, следовательно, коэффициенты переноса равны нулю, поэтому сказанное справедливо и для других макромоделей). Согласно кинетической теории, такой фронт отсутствует из-за возмущающего действия “быстрых” молекул, создающих передний “клин” структуры ударной волны. Последний наиболее выражен в случае максвелловских молекул, наименее – для молекул – упругих сфер.

Для течений смесей газов важен вопрос о способах макроскопического описания при различных отношениях масс молекул. Из кинетической теории следует [12, 13], что при больших значениях этого отношения необходимо, вообще говоря, двухтемпературное (возможно, двухжидкостное) описание¹. Как и ранее [9, 10], ниже рассматриваются однотемпературные барнеттовы модели.

1. Исходные соотношения. Уравнения сохранения для бинарной смеси одноатомных газов в дивергентной форме имеют вид (суммирование по повторяющимся греческим индексам от 1 до 3)

$$L_0 = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_\alpha}{\partial r_\alpha} = 0$$

¹ Шавалиев М.Ш. Многоскоростная многотемпературная газодинамика и ударно-волновые процессы // Дис. ... док. физ.-мат. наук: 01.02.05. Новосибирск: ИТПМ СО РАН СССР, 1992. 241 с.

$$L_1 = \frac{\partial \rho_1}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r_\alpha} \rho_1 (u_\alpha + V_{1\alpha}) = 0 \quad (1.1)$$

$$L_{2\alpha} = \frac{\partial \rho u_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r_\beta} (\rho u_\alpha u_\beta + p \delta_{\alpha\beta} + \pi_{\alpha\beta}) = 0$$

$$L_3 = \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\rho u^2}{2} + \frac{3}{2} p \right) + \frac{\partial}{\partial r_\alpha} \left[u_\alpha \left(\frac{\rho u^2}{2} + \frac{5}{2} p \right) + u_\beta \pi_{\alpha\beta} + h_\alpha + \frac{5}{2} p_1 \left(1 - \frac{m_1}{m_2} \right) V_{1\alpha} \right] = 0$$

Используются обозначения [9, 10]: индексы $i, j = 1, 2$ – номера компонентов смеси; индексами α, β, γ вводятся проекции радиус-вектора $\mathbf{r}$; $\mathbf{u}$ – среднемассовая скорость; $n_i, \rho_i = m_i n_i, m_i, p_i = n_i kT, V_i$ – числовая и массовая плотности, масса молекулы, давление, диффузионная скорость i -го компонента; $\rho = \rho_1 + \rho_2, n = n_1 + n_2, p = nkT$ – массовая и числовая плотности, давление смеси; T – температура; $\pi_{\alpha\beta}$ – компоненты бездивергентного тензора напряжений; h_α – компонента приведенного теплового потока. Применена формула $V_2 = -(\rho_1/\rho_2)V_1$.

Полагая в последних трех уравнениях (1.1)

$$(V_{1\alpha}, \pi_{\alpha\beta}, h_\alpha) = (V_{1\alpha}^{(1)}, \pi_{\alpha\beta}^{(1)}, h_\alpha^{(1)}) \quad (1.2)$$

получаем систему уравнений сохранения в приближении Навье–Стокса (для краткости просто уравнений Навье–Стокса (УНС)). Здесь

$$\begin{aligned} V_{1\alpha}^{(1)} &= -\frac{m_2 n}{x_1 \rho} \mathcal{D}_{12} \left(d_{1\alpha} + k_T \frac{\partial \ln T}{\partial r_\alpha} \right), \quad d_{1\alpha} = \frac{\partial x_1}{\partial r_\alpha} + k_p \frac{\partial \ln p}{\partial r_\alpha} \\ \pi_{\alpha\beta}^{(1)} &= -2\eta e_{\alpha\beta}, \quad h_\alpha^{(1)} = -\lambda \frac{\partial T}{\partial r_\alpha} + p \frac{\rho}{\rho_2} k_T V_{1\alpha}^{(1)} \end{aligned} \quad (1.3)$$

$$k_p = x_1 x_2 (m_2 - m_1) \frac{n}{\rho}, \quad x_i = \frac{n_i}{n}$$

$$e_{\alpha\beta} = \left\langle \frac{\partial u_\alpha}{\partial r_\beta} \right\rangle, \quad \langle N_{\alpha\beta} \rangle = \frac{1}{2} (N_{\alpha\beta} + N_{\beta\alpha}) - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} N_{\gamma\gamma}$$

В соотношениях (1.3) $\mathcal{D}_{12}, \eta, \lambda, k_T$ – коэффициенты бинарной диффузии, вязкости, теплопроводности, термодиффузионное отношение соответственно [10], k_p – коэффициент бародиффузии.

Уравнения Барнетта (УБ) получим, полагая [10]

$$(V_{1\alpha}, \pi_{\alpha\beta}, h_\alpha) = (V_{1\alpha}^{(1)} + V_{1\alpha}^{(2)}, \pi_{\alpha\beta}^{(1)} + \pi_{\alpha\beta}^{(2)}, h_\alpha^{(1)} + h_\alpha^{(2)}) \quad (1.4)$$

Следуя описанному ранее подходу [3], разобьем барнеттовы вклады в переносные свойства

$$(V_{1\alpha}^{(2)}, \pi_{\alpha\beta}^{(2)}, h_\alpha^{(2)}) = (V_{1\alpha}^A + V_{1\alpha}^B, \pi_{\alpha\beta}^A + \pi_{\alpha\beta}^B, h_\alpha^A + h_\alpha^B) \quad (1.5)$$

Барнеттовы вклады в напряжения запишем в виде

$$\pi_{\alpha\beta}^A = \xi_1 e_{\alpha\beta} \nabla \mathbf{u} - \xi_2 \left\langle 2 \frac{\partial u_\gamma}{\partial r_\alpha} e_{\gamma\beta} + \frac{\partial u_\gamma}{\partial r_\beta} \frac{\partial u_\alpha}{\partial r_\gamma} \right\rangle + \xi_3 \langle e_{\alpha\gamma} e_{\gamma\beta} \rangle \quad (1.6)$$

$$\begin{aligned} \pi_{\alpha\beta}^B &= -\xi_2 \left\langle \frac{\partial}{\partial r_\alpha} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial r_\beta} \right) \right\rangle + \xi_4 \left\langle \frac{\partial^2 T}{\partial r_\alpha \partial r_\beta} \right\rangle + \xi_5 \left\langle \frac{\partial T}{\partial r_\alpha} \frac{\partial T}{\partial r_\beta} \right\rangle + \xi_6 \left\langle \frac{\partial p}{\partial r_\alpha} \frac{\partial T}{\partial r_\beta} \right\rangle + \\ &+ \xi_7 \left\langle \frac{\partial d_{1\beta}}{\partial r_\alpha} \right\rangle + \left\langle \frac{\partial T}{\partial r_\alpha} \left(\xi_8 \frac{\partial x_1}{\partial r_\beta} + \xi_9 d_{1\beta} \right) \right\rangle + \left\langle d_{1\alpha} \left(\xi_{10} \frac{\partial p}{\partial r_\beta} + \xi_{11} \frac{\partial x_1}{\partial r_\beta} + \delta \xi_{12}^* d_{1\beta} \right) \right\rangle \end{aligned} \quad (1.7)$$

Как и ранее [10], выражения для вкладов в векторные переносные свойства объединяем, записывая их более компактно,

$$\Lambda_{\alpha}^A = \left(\varphi_1 + \frac{\varphi_2}{3} \right) \frac{\partial T}{\partial r_{\alpha}} \nabla \mathbf{u} + \left(\varphi_2 \frac{\partial T}{\partial r_{\beta}} - 2\varphi_7 \frac{\partial x_1}{\partial r_{\beta}} \right) \frac{\partial u_{\beta}}{\partial r_{\alpha}} + \\ + \left(\varphi_4 \frac{\partial T}{\partial r_{\beta}} + (\varphi_8 + \varphi_9 + \delta\varphi_9^*) \frac{\partial x_1}{\partial r_{\beta}} \right) e_{\beta\alpha} + \varphi_6 \frac{\partial x_1}{\partial r_{\alpha}} \nabla u \quad (1.8)$$

$$\Lambda_{\alpha}^B = \left(\frac{\varphi_2}{3} T - \varphi_7 \frac{5}{3} k_p \right) \frac{\partial \nabla \mathbf{u}}{\partial r_{\alpha}} + \left[\varphi_3 + (\varphi_9 + \delta\varphi_9^*) \frac{k_p}{p} \right] \frac{\partial p}{\partial r_{\beta}} e_{\beta\alpha} + \\ + \varphi_5 \frac{\partial e_{\alpha\beta}}{\partial r_{\beta}} + \left(\varphi_6 \frac{\nabla p}{\partial r_{\alpha}} \nabla \mathbf{u} - 2\varphi_7 \frac{\partial p}{\partial r_{\beta}} \frac{\partial u_{\beta}}{\partial r_{\alpha}} \right) \frac{k_p}{p} \quad (1.9)$$

В формулах (1.6)–(1.9) использованы определения (1.3) для оператора $\langle \cdot \rangle$ и коэффициента k_p , выражения $x_2 = 1 - x_1$, $d_{2\alpha} = -d_{1\alpha}$, $\nabla \mathbf{u} = \partial u_{\alpha} / \partial r_{\alpha}$.

Из выражений (1.8), (1.9) путем замены [10]

$$(\Lambda_{\alpha}^A, \Lambda_{\alpha}^B) \rightarrow (h_{\alpha}^A, h_{\alpha}^B), \quad \varphi_m \rightarrow \gamma_m, \quad \delta\varphi_9^* \rightarrow \delta\gamma_9^*, \quad m = 1, 2, \dots, 9 \quad (1.10)$$

(величина $\delta\gamma_9^*$ дана формулой (4.4) работы [9]) получают выражения для h_{α}^A , h_{α}^B , а путем замены

$$(\Lambda_{\alpha}^A, \Lambda_{\alpha}^B) \rightarrow (V_{1\alpha}^A, V_{1\alpha}^B), \quad \varphi_m \rightarrow \delta_m, \quad \delta\varphi_9^* \rightarrow 0 \quad (1.11)$$

получаются выражения для $V_{1\alpha}^A$, $V_{1\alpha}^B$.

Система усеченных уравнений Барнетта (УУБ) при учете соотношений (1.1)–(1.11) имеет вид

$$L_0 = 0, \quad L_1^0 = 0, \quad L_{2\alpha}^0 = 0, \quad L_3^0 = 0 \quad (1.12)$$

Выражения для L_1^0 , $L_{2\alpha}^0$, L_3^0 получаются из L_1 , $L_{2\alpha}$, L_3 , определенных формулами (1.1), заменой

$$(V_{1\alpha}, \pi_{\alpha\beta}, h_{\alpha}) = (V_{1\alpha}^{(1)} + V_{1\alpha}^A, \pi_{\alpha\beta}^{(1)} + \pi_{\alpha\beta}^A, h_{\alpha}^{(1)} + h_{\alpha}^A) \quad (1.13)$$

Таким образом, в систему УУБ включены только те слагаемые барнеттовых переносных свойств, которые содержат парные произведения первых производных от компонент вектора скорости, температуры и концентраций, не повышающие порядок системы по сравнению с порядком системы УНС.

Система неоднородных УУБ имеет вид

$$L_0 = 0, \quad L_1^0 = -\left(\frac{\partial}{\partial r_{\alpha}} \rho_1 V_{1\alpha}^B \right)_0, \quad L_{2\alpha}^0 = -\left(\frac{\partial}{\partial r_{\beta}} \pi_{\alpha\beta}^B \right)_0 \\ L_3^0 = -\left(\frac{\partial}{\partial r_{\alpha}} \left(u_{\beta} \pi_{\alpha\beta}^B + h_{\alpha}^B + \frac{5}{2} p_1 \left(1 - \frac{m_1}{m_2} \right) V_{1\alpha}^B \right) \right)_0 \quad (1.14)$$

Правые части уравнений (1.14) рассчитываются на решении системы (1.12). Полная система УБ получается, если опустить нижний нулевой индекс в последних трех уравнениях (1.14).

В одномерном случае обозначим $r_1 = x$, $u_x = u$. Ось x направлена по потоку, условиям перед ударной волной соответствуют условия при $x = -\infty$.

Формулы (1.6) и (1.7) приводятся к виду (штрих означает частную производную по x)

$$\begin{aligned} \pi_{xx}^A &= \frac{2}{3} \left(\xi_1 - \frac{7}{3} \xi_2 + \frac{1}{3} \xi_3 \right) u'^2 \\ \pi_{xx}^B &= \frac{2}{3} \left\{ -\xi_2 \left(\frac{p'}{\rho} \right)' + \xi_4 T'' + \xi_5 T'^2 + \xi_6 p' T' + \xi_7 d'_{1x} + \right. \\ &\quad \left. + (\xi_8 x'_1 + \xi_9 d'_{1x}) T' + (\xi_{10} p' + \xi_{11} x'_1 + \delta \xi_{12}^* d'_{1x}) d'_{1x} \right\} \end{aligned} \quad (1.15)$$

“Рабочие” выражения для ξ_n ($n = 1, 2, \dots, 12$) даются правыми частями формул (3.2) работы [10]. Величину $\delta \xi_{12}^*$ вычисляем по формуле (4.4) работы [9]. Формулы (1.8), (1.9) сводятся к виду

$$\begin{aligned} \left\| \begin{matrix} h_x^A \\ V_{1x}^A \end{matrix} \right\| &= \left\| \begin{matrix} \Phi_1^h \\ \Phi_1^V \end{matrix} \right\| u' T' + \left\| \begin{matrix} \Phi_2^h + \delta \gamma_9^* \\ \Phi_2^V \end{matrix} \right\| u' x'_1 \\ \left\| \begin{matrix} h_x^B \\ V_{1x}^B \end{matrix} \right\| &= \left\| \begin{matrix} \Phi_3^h \\ \Phi_3^V \end{matrix} \right\| u'' + \left\| \begin{matrix} \Phi_4^h + \frac{k_p}{p} \delta \gamma_9^* \\ \Phi_4^V \end{matrix} \right\| u' p' \end{aligned} \quad (1.16)$$

$$\begin{aligned} \Phi_1^h &= \gamma_1 + \frac{2}{3} (2\gamma_2 + \gamma_4), \quad \Phi_2^h = \gamma_6 - 2\gamma_7 + \frac{2}{3} (\gamma_8 + \gamma_9) \\ \Phi_3^h &= \frac{T}{3} \gamma_2 + \frac{2}{3} \gamma_5 - \frac{5}{3} \gamma_7 k_p, \quad \Phi_4^h = \frac{2}{3} \gamma_3 + \left(\gamma_6 - 2\gamma_7 + \frac{2}{3} \gamma_9 \right) \frac{k_p}{p} \end{aligned} \quad (1.17)$$

Для получения Φ_k^V ($k = 1, 2, 3, 4$) нужно в выражениях (1.17) заменить γ_m на δ_m согласно (1.10), (1.11). “Рабочие” выражения для коэффициентов γ , δ вычисляются при помощи правых частей формул (3.4) и формул (3.6), (3.10) работы [10]. Окончательные формулы для Φ_k^h , Φ_k^V и коэффициентов в (1.15) имеют громоздкий вид и здесь не приводятся.

2. Численные методики. Ранее [2] для расчета структуры сильной ударной волны в простом газе стационарные системы одномерных модифицированных УБ интегрировались вверх по потоку из окрестности особой точки при $x = \infty$. Однако для полной системы УБ такая методика неприменима из-за известных свойств ее особых точек, поэтому применяется метод установления [1, 4]. К тому же анализ особых точек в случае смеси газов значительно усложняется.

Численное решение строится на равномерной одномерной сетке. При выборе начального приближения использовались следующие процедуры. Для системы УНС при $t = 0$ ударная волна в виде бесконечно тонкого скачка уплотнения размещается в середине контрольного объема (число ячеек выбирается четным). Решение этой системы применялось в качестве начального приближения для системы УУБ (1.12) (здесь и ниже имеются в виду соответствующие системы одномерных уравнений)

при тех же граничных условиях. Для полной системы УБ (и для системы (1.14) при $M < 11$) можно использовать оба подхода, но вычисления выполняются в несколько этапов: на первом этапе применялась грубая сетка, на втором этапе в качестве начального использовалось решение, полученное на первом этапе, но количество ячеек увеличивалось в два раза и т.д. (см. разд. 3). Аналогичная процедура использовалась для решения системы неоднородных УУБ (1.14) при $M \geq 11$, но в качестве начального выбиралось решение системы (1.12). На границе расчетной области ставились граничные условия, соответствующие набегающему потоку, на другой границе фиксировалось давление, а для других параметров (температуры, скорости, плотности и концентрации компонента) использовалась экстраполяция граничных условий.

Для аппроксимации конвективных членов системы уравнений использовалась “кинетически согласованная” разностная схема [14], с применением известных процедур коррекции потоков, используемых при построении схем, аналогичных описанной ранее [15]. На гладких решениях скорректированная таким образом схема имеет повышенный (выше первого) порядок аппроксимации. Для аппроксимации вязких членов уравнений использовалась схема центральной разности второго порядка точности, но в некоторых расчетах для обеспечения устойчивости системы неоднородных УУБ (1.14) порядок аппроксимации повышался до четвертого. В качестве условия устойчивости для предложенной схемы принята эмпирическая формула [16]

$$\Delta t \leq \alpha \frac{\Delta x Cu}{u(1 + 2Re^{-1})}, \quad Re = \frac{\rho u \Delta x}{\eta}$$

где коэффициент запаса $\alpha = 0.7$, число Куранта $Cu \leq 1/2$, пространственный шаг $\Delta x \leq 1/3 l$, l – минимальная длина свободного пробега в расчетной области, u – локальная скорость в ячейке, Re – сеточное число Рейнольдса.

Рассматриваемая задача решалась также методом прямого статистического моделирования с использованием известного алгоритма [17]. В начальный момент времени ударная волна в виде бесконечно тонкого скачка уплотнения размещается в середине контрольного объема. Стационарное распределение всех параметров среды вычисляется после установления процесса во времени. Для того чтобы скачок был стационарен, новые частицы вводятся в контрольный объем через данный участок границы так, чтобы на этом участке средние по времени потоки вещества, импульса и энергии равнялись своим теоретическим значениям [17].

Для моделирования столкновений частиц использовался алгоритм [18], обеспечивающий необходимую частоту столкновений и минимизацию объема вычислений. Для апробации предложенных методик проводились сравнения с известными результатами [2, 3, 17]. В случае максвелловских молекул применялась [17] VHS-модель (молекулы – упругие сферы переменного диаметра) для характерной температуры, равной 273 К. Средняя длина свободного пробега перед ударной волной

$$l = \sum_{i=1}^2 x_i \left[\sum_{j=1}^2 \pi d_{ij}^2 n_j \left(\frac{m_1 + m_2}{m_j} \right)^{1/2} \right]^{-1} \quad (2.1)$$

Диаметр “псевдосферы” d_{ij} VHS-модели выражается через ее параметры [17]. Число Маха перед волной

$$M = \frac{u_-}{a}, \quad a^2 = \frac{5n_-}{3\rho_-} kT_-, \quad T_- \equiv T(x = -\infty) = 273 \text{ K} \quad (2.2)$$

Используются безразмерные переменные

$$x^* = \frac{x}{l}, \quad T^* = \frac{T(x^*) - T(-\infty)}{T(\infty) - T(-\infty)}, \quad \rho^* = \frac{\rho(x^*) - \rho(-\infty)}{\rho(\infty) - \rho(-\infty)}, \quad x_1^* = \frac{x_1(x^*) - x_1(-\infty)}{x_1(\infty) - x_1(-\infty)} \quad (2.3)$$

3. Математические особенности барнеттовых моделей. Математическая теория УБ и их модификаций не разработана, доказательства носят полуэмпирический численный характер. В частности, не проводился достаточно полный анализ вопросов устойчивости.

Коротковолновая неустойчивость УБ обсуждалась в статьях, в которых использовался численный метод установления [4]. При дроблении сетки начинаются биения, а затем происходит распад решения. Для подавления неустойчивости были введены демпфирующие полуэмпирические слагаемые, несущественно влияющие на решение, в результате получена система расширенных (augmented) УБ. Были приведены [4] результаты расчетов при помощи этой системы на мелкой сетке и исходной системы УБ на грубой сетке, т.е. на сетке, близкой к “неустойчивой”. Практически совпадают данные по толщине ударной волны вплоть до $M = 50$ и по профилю температуры вдоль критической линии гиперзвукового течения около кругового цилиндра при небольшой разреженности. Эти и другие данные обусловили утверждение, что включение в УБ дополнительных демпфирующих слагаемых было обусловлено в основном переходом к дву- и трехмерным задачам обтекания [4].

Проведенные систематические расчеты при помощи использованной здесь методики показали практическую сходимость решения УБ на грубой сетке. Например, в случае максвелловских молекул при $M = 25$, $m_2 = 2m_1$, $d_{11} = d_{22}$, $x_1(-\infty) = 1/2$ для $x^* = -50, -40, -30$ соответственно имеем

$$T^* = (0.07, 0.03, 0.00), (0.21, 0.16, 0.14), (0.39, 0.38, 0.37)$$

Последние величины в скобках получены при значении шага $\Delta_* x$, близком к “неустойчивому”, вторые – при $\Delta x = 2\Delta_* x$, первые – при $\Delta x = 4\Delta_* x$. Изменения происходят в третьем знаке. В остальной части ударной волны сходимость примерно такая же, как для $x^* = -30$.

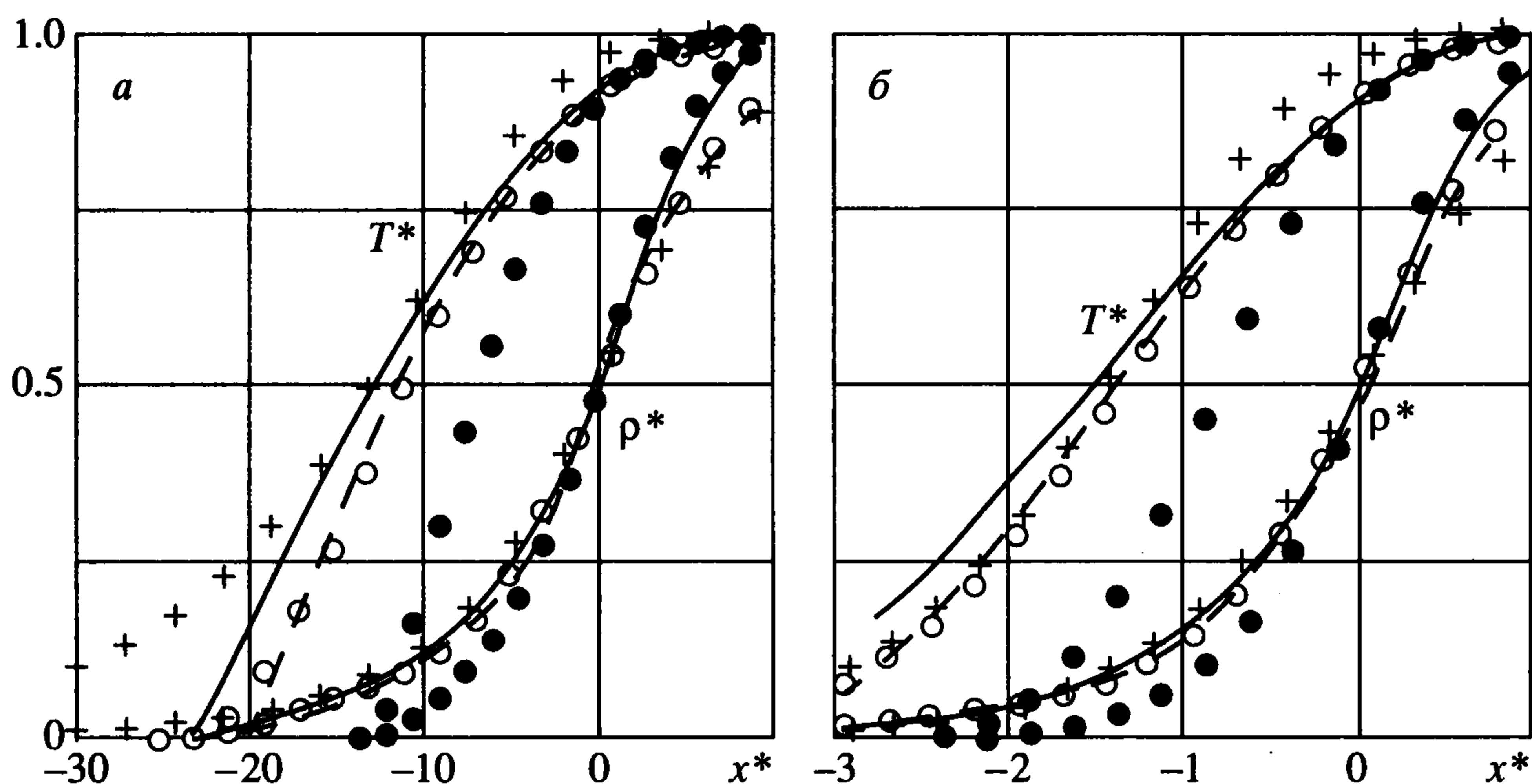
В силу сказанного для качественных целей будем считать решением системы УБ “установившиеся” результаты расчетов на грубой сетке, близкой к неустойчивой.

Однако не обсуждался принципиальный для теории макромоделей структуры сильной ударной волны факт (см. вводную часть статьи): при $M = \infty$ область возмущенного течения отделена от однородного набегающего потока фронтом, на поверхности которого рвутся производные. Положение фронта различно для различных моделей. Если координату x отсчитывать от фронта по потоку, то до фронта (при $x < 0$) температура T и давление p равны нулю, а при $x = +0$ имеем [11] $(T, p) \sim x^{1/n}$, где n – показатель зависимости коэффициента вязкости газа от T . Особенность наиболее значима в случае максвелловских молекул, когда $n = 1$ (для молекул – упругих сфер $n = 1/2$).

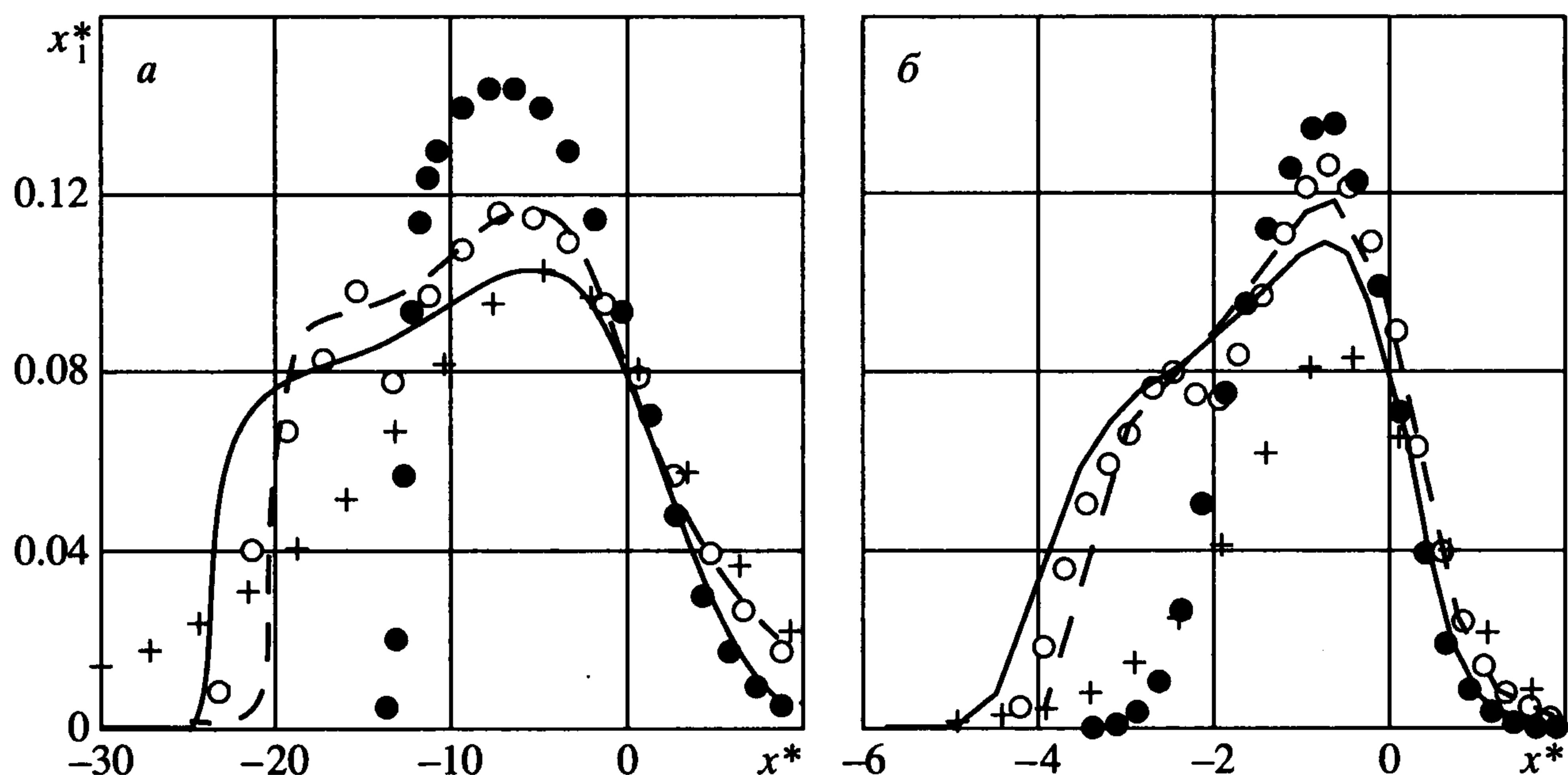
При больших, но конечных M эта поверхность размывается, превращаясь в зону резкого увеличения производных, тем более резкого, чем больше порядок производных.

Следующие замечания связаны с выделением базиса, относительно которого выстраивается метод итераций для решения системы УБ [2, 3], т.е. с решением вопроса о том, какие барнеттовы слагаемые нужно удерживать в уравнениях (1.12).

Первоначально [2] предполагалось не включать в базис только те слагаемые π_{xx} и q_x , которые содержат вторые производные от T , и (чтобы избавиться от коротковолновой неустойчивости и понизить порядок системы уравнений до навье-стоксова, в однократно проинтегрированных стационарных УБ плотность была исключена). Однако при принятом [2, 3] интегрировании вверх по потоку иногда не удавалось дойти до тех значений x , где состояние потока достаточно близко к предельному.



Фиг. 1



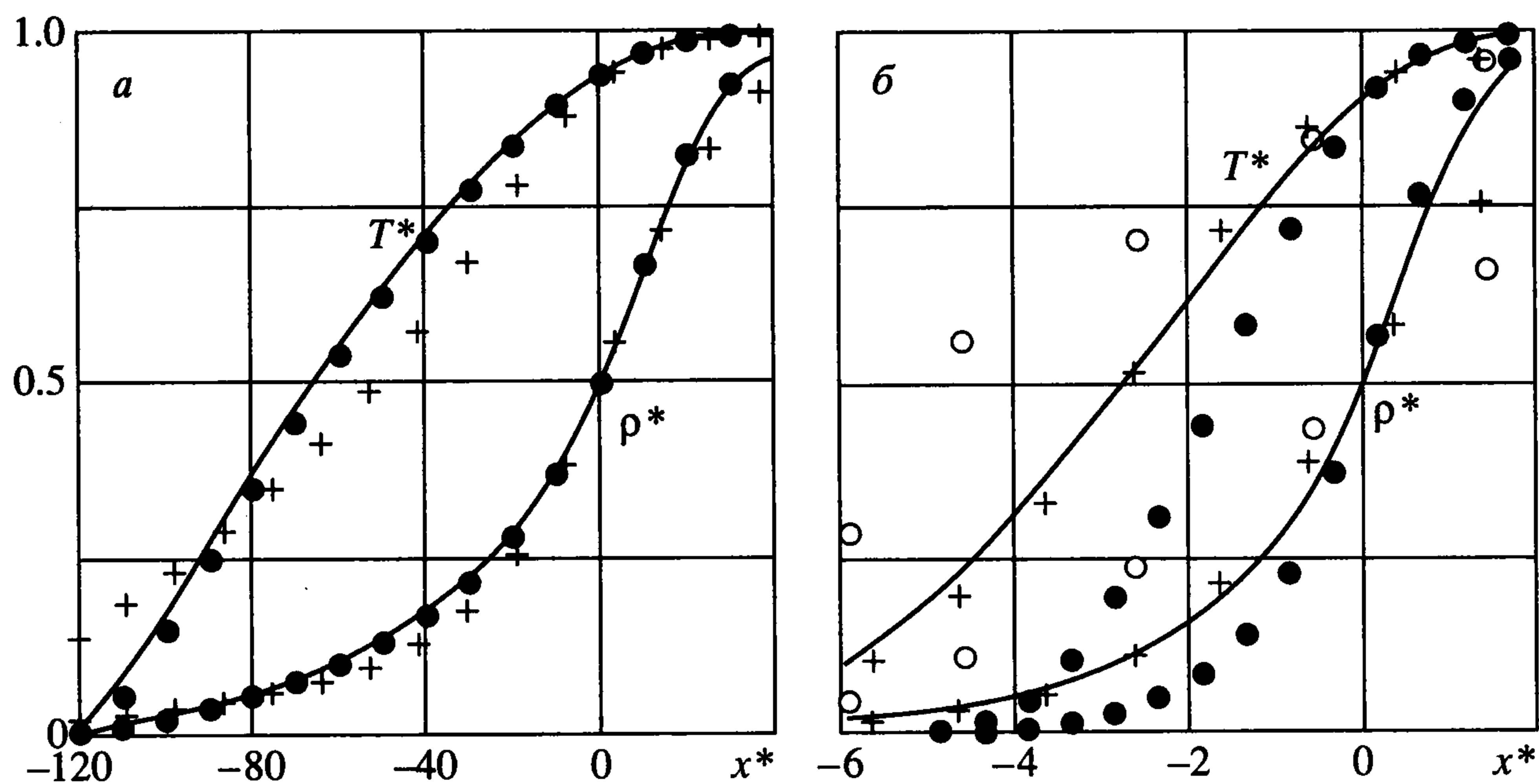
Фиг. 2

Этот “дефект” был устранен переносом слагаемого π_{xx} , содержащего T'^2 , в неоднородную часть [2]. Такой подход был уточнен и обобщен [3]. С помощью используемого здесь метода установления вопрос об этом переносе был проанализирован заново. Слагаемое $^{2/3}\xi_5 T'^2$ было учтено в π_{xx}^A , т.е. в УУБ, что привело к возникновению биений в передней части ударной волны. С ростом M протяженность области биений увеличивается, монотонное решение получается только на грубой сетке, при этом рассматриваемое слагаемое слабо влияет на решение. Перенос слагаемого в неоднородную часть ликвидирует биения.

Аналогичные эффекты имеют место и для уравнений (1.14) из-за сильной нелинейности правых частей.

Перенос в π_{xx}^B слагаемого, содержащего $x_1'^2$, имеет непринципиальное значение, так как изменения x_i внутри ударной волны малы по сравнению с изменением T или ρ . Слагаемые Λ_x^A , содержащие x_1' , оказывают несущественное влияние на решение.

Представленные результаты расчетов получены без учета этих слагаемых в Λ_x^A .



Фиг. 3

При добавлении в УБ демпфирующих слагаемых [4, 5] не только ликвидируется коротковолновая неустойчивость, но и “размывается”, по-видимому, указанная область биений, хотя последнее даже не обсуждалось. Для целей данной статьи достаточно принятые численные методики.

4. Применимость барнеттовых моделей. На фиг. 1–3 представлены результаты расчетов, полученные для случаев максвелловских молекул (а) и молекул – упругих сфер (б) при помощи метода прямого статистического моделирования (МПСМ) (крестики), систем УНС (темные точки) и УБ (светлые точки), УУБ (сплошные кривые) и неоднородных УУБ (штриховые кривые). Обозначения даны формулами (2.1)–(2.3). Всюду $M = 11$ (традиционное значение для данной задачи [1–3]), $d_{11} = d_{22}$, $x_i(-\infty) = 1/2$. Расчеты проводились для разных значений параметров, приведены наиболее характерные результаты. Изменение M от пяти и выше не влияет на сделанные выводы.

Данные на фиг. 1, 2 получены при $m_2/m_1 = 2$. Эти и другие результаты расчетов позволяют сделать следующее заключение (напомним, что $u \sim 1/\rho$): при небольших относительных различиях масс и диаметров молекул выводы о точности моделей для профилей T^* , ρ^* качественно такие же, как и для простого газа [2, 3]: УБ кардинально уточняют УНС, т.е. дают результаты, гораздо более близкие к результатам по МПСМ. Результаты расчетов в рамках неоднородных УУБ (1.14) и в рамках УБ оказываются близкими.

Принципиальным отличием от полученных ранее результатов [2, 3] является то, что здесь приведены данные, полученные при помощи УУБ (1.12). В случае максвелловских молекул в передней части ударной волны УУБ даже точнее полной системы УБ (фиг. 1). В плотной же части ударной волны они близки к УНС, однако здесь отличие результатов расчетов по УУБ от расчета по МПСМ составляет около 10%. Важным является тот факт [4, 5], что в задачах обтекания УБ существенно уточняют результаты расчетов по УНС для температуры именно в передней части волны. УУБ не присущи перечисленные выше “дефекты” неустойчивости и действия области биений. В случае простого газа особые точки и вообще фазовая картина структуры ударной волны такие же, как и для УНС [3]. Иными словами, основные свойства УУБ близки к свойствам УНС.

В свете изложенного можно упростить алгоритм [3] построения ненавье-стоксовых моделей, выделив как основную модель УУБ и упростив ее переносом ряда сла-

гаемых (содержащих производные от x_1) в следующую итерацию. Конечно, для других классов задач более эффективным может быть несколько иная структура базисной системы УУБ.

Относительные изменения концентраций гораздо меньше изменений T^* , ρ^* , причем они сильнее зависят от параметров задачи. Необходимы повышенные требования к точности расчета $x_i(x^*)$, в том числе и к МПСМ. Полученные для случая максвелловских молекул данные на фиг. 2, *а* демонстрируют преимущества барнеттовых моделей по сравнению с навье-стоксовой в передней части ударной волны. Однако в случае молекул – упругих сфер (фиг. 2, *б*) эти преимущества фактически отсутствуют. Отличительная особенность барнеттовых моделей – немонотонность профилей концентраций, особенно выраженная для полной системы УБ.

С ростом m_2/m_1 изложенные выводы о преимуществах барнеттовых моделей теряют силу (фиг. 3). Для максвелловских молекул при $m_2/m_1 = 100$ барнеттовы и навье-стоксовы профили T^* , ρ^* почти сливаются (поэтому на фиг. 3, *а* приведены только результаты расчетов в рамках УУБ и УНС). Отличие навье-стоксовых профилей от результатов расчета по МПСМ значительно меньше, чем на фиг. 1.

Применимость барнеттовых моделей ухудшается в случае молекул–упругих сфер. Уже при $m_2/m_1 = 10$ (фиг. 3, *б*), согласно полной системе УБ, чрезмерно расширяется область возмущенного течения. УУБ дают здесь приемлемые результаты, однако при $m_2/m_1 = 100$ они дают гораздо худшее согласие с расчетами МПСМ, чем УНС (особенно для T^*).

Аналогичны выводы о точности барнеттовых моделей для профиля x_1^* при больших m_2/m_1 .

Таким образом, при использовании предельных законов межмолекулярного взаимодействия получены общие выводы о точности барнеттовых моделей при небольших относительных различиях масс молекул (в частности при $m_2/m_1 = 2$), аналогичные случаю простого газа. При больших различиях масс молекул области применимости макромоделей принципиальным образом зависят от принятого закона взаимодействия, и необходим соответствующий анализ на конкретных смесях газов.

Авторы благодарят В.В. Войкова и И.В. Воронича за плодотворные консультации по численным методам.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (02-01-00501) и программы “Государственная поддержка ведущих научных школ” (00-15-96069).

ЛИТЕРАТУРА

1. Галкин В.С., Шавалиев М.Ш. Газодинамические уравнения высших приближений метода Чепмента–Энскога // Изв. РАН. МЖГ. 1998. № 4. С. 3–28.
2. Бузыкин О.Г., Галкин В.С., Носик В.И. Модификации уравнений Барнетта и структура ударной волны // Изв. РАН. МЖГ. 1998. № 3. С. 164–176.
3. Бузыкин О.Г., Галкин В.С. О модификациях газодинамических уравнений высших приближений метода Чепмена–Энскога // Изв. РАН. МЖГ. 2001. № 3. С. 185–199.
4. Zhong X., MacCormack R.W., Chapman D.R. Stabilization of the Burnett equations and application to hypersonic flows // AIAA J. 1993. V. 31. № 6. P. 1036–1043.
5. Agarwal R., Yun K.-Y., Balakrishnan R. Beyond Navier–Stokes: Burnett equations for flows in the continuum – transition regime // Phys. Fluids. 2001. V. 13. № 10. P. 3061–3085.
6. Cheng H.K., Emanuel G. Perspective on hypersonic nonequilibrium flow // AIAA J. 1995. V. 33. № 3. P. 386–400.

7. Жданов В.М., Ролдугин В.И. Неравновесная термодинамика и кинетическая теория разреженных газов // Успехи физ. наук. 1998. Т. 168. № 4. С. 407–438.
8. Шавалиев М.Ш. Исследование структуры слабой ударной волны и распространения малых возмущений в смесях газов при помощи уравнений Барнетта // ПММ. 1999. Т. 63. Вып. 3. С. 444–456.
9. Галкин В.С. Уравнения Барнетта для многокомпонентных смесей многоатомных газов // ПММ. 2000. Т. 64. Вып. 4. С. 590–604.
10. Галкин В.С., Жаров В.А. О переносных свойствах газов в приближении Барнетта // ПММ. 2002. Т. 66. Вып. 3. С. 434–447.
11. Сычев В.В. О гиперзвуковых течениях вязкого теплопроводного газа // ПММ. 1961. Т. 25. Вып. 4. С. 600–610.
12. Галкин В.С., Макашев Н.К. О кинетическом выводе уравнений газодинамики многокомпонентных смесей легких и тяжелых частиц // Изв. РАН. МЖГ. 1994. № 1. С. 180–200.
13. Горбачев Ю.Е. О многоскоростных моделях в теории гетерогенных сред // Изв. АН. СССР. МЖГ. 1991. № 3. С. 54–66.
14. Voronich I., Voikov V., Khlopkov Yu. Application of kinetic models for the construction of finite difference schemes in gas dynamics // Proc. 3rd Seminar on RRDPAE. Warsaw, 1999. P. 163–166.
15. Колган В.П. Применение принципа минимальных значений производной к построению конечно-разностных схем для расчета разрывных решений газовой динамики // Учен. зап. ЦАГИ. 1972. Т. 3. № 6. С. 68–77.
16. Anderson D.A., Tannehill I.C., Pletcher R.H. Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer. N.Y.: Hemisphere, 1984 = Андерсон Д., Таннехилл Дж., Плетчер Р. Вычислительная гидродинамика и теплообмен: Т. 1. М.: Мир, 1990. 384 с.
17. Bird G.A. Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows. Oxford: Clarendon Press, 1994. 458 p.
18. Белоцерковский О.М., Яницкий В.Е. Статистический метод частиц в ячейках для решения задач динамики разреженного газа. 1. Основы построения метода // Журн. Вычисл. математики и мат. физики. 1975. Т. 15. № 5. С. 1195–1208. 2. Вычислительные аспекты метода. № 6. С. 1553–1567.
19. Лукишин А.В., Смирнов С.Н. Об одном стохастическом методе решения уравнения Больцмана // Журн. Вычисл. математики и мат. физики. 1988. Т. 28. № 2. С. 293–297.