

УДК 533.6.011.72:533.72

ПОСТУПАТЕЛЬНАЯ НЕРАВНОВЕСНОСТЬ ГАЗА ПРИ ИСТЕЧЕНИИ В ВАКУУМ В КАНАЛЕ ПОСТОЯННОГО СЕЧЕНИЯ

С. В. Куликов

Институт проблем химической физики РАН, 142432 Черноголовка
E-mail: kuls@icp.ac.ru

Методом Монте-Карло нестационарного статистического моделирования выполнены расчеты истечения однокомпонентного газа в вакуум в канале постоянного сечения. Показано, что продольная, поперечная и полная кинетические температуры существенно различаются в головной части потока, что является следствием возникшей поступательной неравновесности. Течение практически автомодельно во всей области расширения потока (за исключением распределений поперечной и полной кинетических температур в головной части газового потока), что позволяет предсказать параметры течения при временах больших, чем те, при которых было проведено моделирование.

Ключевые слова: газ, вакуум, статистическое моделирование.

Введение. Очевидно, что при истечении газа в вакуум четкая физическая граница между веществом и вакуумом отсутствует, в то время как в решении данной задачи на макроуровне методами гидродинамики такая граница имеется. Кроме того, не исключено, что распределение молекул по поступательным степеням свободы в головной части газового потока отличается от максвелловского. В данной работе выполнено численное исследование течения в канале постоянного сечения с применением метода Монте-Карло нестационарного статистического моделирования. Следует отметить, что данный метод фактически позволяет получать решение уравнения Больцмана, не решая последнее. Кроме того, метод Монте-Карло нестационарного статистического моделирования может использоваться для моделирования установившихся течений, реализующихся при выходе на стационарное состояние.

Основные цели работы — проверка автомодельности и исследование поступательной неравновесности головной части газового потока при истечении газа в вакуум в канале постоянного сечения.

Имеется большое количество работ, посвященных изучению истечения газов в вакуум, однако в них, как правило, рассматриваются другие условия расширения газа. Следует отметить лишь работы [1–3]. В [1. С. 516, задача 2] рассмотрено течение в канале постоянного сечения, но на макроскопическом (гидродинамическом) уровне. В работах [2, 3] представлены также результаты статистического моделирования столкновений газов. До момента столкновения потоков задача совпадает с рассмотренной в данной работе, но изучению этой стадии эволюции газовой системы в [2, 3] уделяется мало внимания. Следует отметить, что задача истечения газа в вакуум в канале постоянного сечения во многом аналогична задаче нестационарного испарения в вакуум с плоской поверхности (см., например, [4]).

1. Постановка задачи и методика моделирования. Рассматривается одномерное течение однокомпонентного газа без внутренних степеней свободы в одномерном про-

странстве координат (канал с большим постоянным сечением, влияние боковых стенок не учитывается). Первоначально газ находился в части канала A , отделенной перегородкой от области вакуума в части канала B . После мгновенного удаления перегородки происходило перемещение газа в эту область. Моделирование проводилось в интервале времени, в течение которого молекулы не успевали достигнуть конца части канала B .

В расчетах использовался описанный в [5–7] метод Монте-Карло нестационарного статистического моделирования, основанный на предложенном в [8] принципе расщепления молекулярного движения и межмолекулярных столкновений.

Процедура моделирования состоит в следующем. Моделируемая среда заменяется системой модельных частиц. В первый момент времени в соответствии с начальными условиями частицы имеют заданные скорости и распределены по ячейкам, на которые разбито исследуемое пространство. Полагается, что столкновения парные и могут происходить с определенной вероятностью только между частицами, находящимися в одной ячейке.

Процесс эволюции рассматриваемой системы за интервал времени Δt расщепляется на два этапа: 1) только перемещение частиц с неизменными скоростями в промежутке времени Δt (этап перемещений); 2) только изменение скоростей частиц в соответствии с результатами розыгрыша с определенными вероятностями их столкновений в том же промежутке времени при фиксированных положениях частиц (этап столкновений).

Молекулы рассматривались как твердые сферы равных диаметров без внутренней структуры. Моделирование выполнено в одномерном пространстве координат и в трехмерном пространстве скоростей. Иными словами, отслеживалась только координата частиц вдоль потока, но при столкновениях пары частиц рассматривались все три составляющие их векторов скоростей.

Отрезок прямой, представляющий собой область моделирования, был ограничен стенками, упруго отражающими молекулы, и разбит на 6400 ячеек равной длины Δx . Этот отрезок делился на части A и B . В области A вначале находились частицы (в среднем по 9600 в ячейке), другая часть была пуста. Начальное распределение частиц по скоростям полагалось максвелловским. Время расщепления этапов перемещений и столкновений было равно $\Delta t = 0,05$; $\Delta x = 0,6$. Здесь и далее, как правило, расстояние нормировано на среднюю длину свободного пробега в газе λ , скорость — на наиболее вероятную тепловую скорость частиц ν , время — на величину λ/ν . Величины λ и ν определялись в начальный момент времени.

2. Результаты и их обсуждение. На рис. 1 приведены профили параметров потока для двух моментов времени. Здесь концентрация n , продольная T_l и поперечная T_t кинетические температуры нормированы на их начальные значения на отрезке A . Полная кинетическая температура T_s не показана, чтобы не перегружать график. Ее величина легко определяется по T_l и T_t : $T_s = (T_l + 2T_t)/3$. Большая часть потока с высокой точностью соответствует гидродинамическому автомодельному течению в виде волны разрежения (ВР) [1]. На рис. 1 данные решения показаны отрезками линий 5, 10 для скорости потока s . Следует отметить, что реальная область распространения вещества значительно больше полученной из аналитического решения.

Для аналитического решения в виде ВР в силу автомодельности характерно постоянство параметров течения в точке их начального разрыва на границе между частями A и B отрезка, что с достаточной точностью воспроизводится при моделировании (см. рис. 1 и табл. 1, в которой представлены значения макропараметров потока в данной точке при $x = 660$ для различных моментов времени). Именно в этой точке на границе между частями A и B отрезка проявляется указанная выше специфика течения, а в точке $x = 0$ особенностей не наблюдается. Следует отметить, что, поскольку область A была расположена справа, поток направлен в отрицательном направлении оси x . В табл. 1 приведены

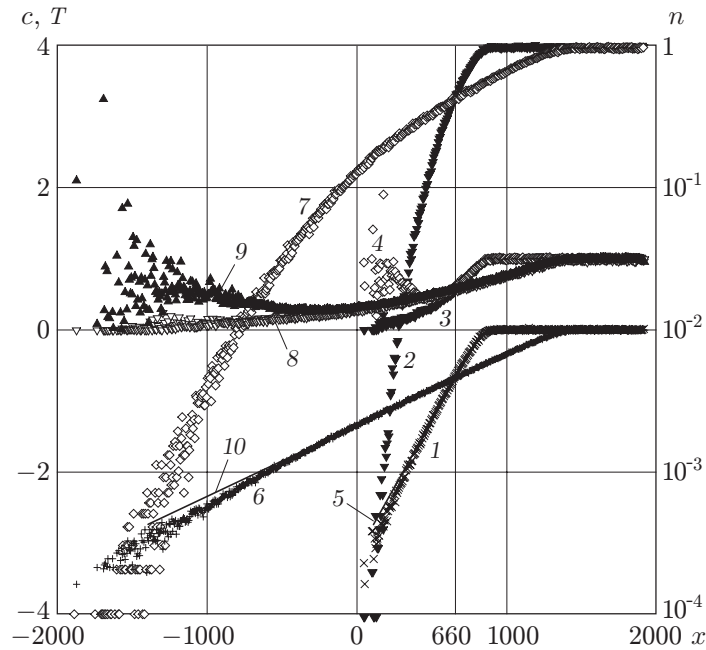


Рис. 1. Профили скорости c (1, 5, 6, 10), концентрации n (2, 7) и кинетических температур (продольной T_l (3, 8) и поперечной T_t (4, 9)):

1–5 — $t = 200\lambda/\nu$; 6–10 — $t = 750\lambda/\nu$; 5, 10 — результаты гидродинамического расчета

Таблица 1

Результаты решения при $x = 660$

t	n	c	T_l	T_t	T_s
200	0,450	-0,644	0,547	0,606	0,586
400	0,449	-0,662	0,546	0,583	0,570
750	0,434	-0,669	0,578	0,571	0,573
Макроскопическая теория	0,422	-0,685	—	—	0,562

также параметры течения, полученные аналитически согласно [1] в той же точке $x = 660$. Отмеченное выше постоянство макропараметров свидетельствует о достоверности полученных результатов моделирования.

В головной части потока значения T_l и T_t существенно различаются (см. рис. 1), причем $T_t > T_l$. Это является следствием возникшей поступательной неравновесности. Кроме того, следует отметить немонотонность профиля T_t . Передовые молекулы головной части потока движутся практически без столкновений, поэтому их распределение по поперечной скорости должно быть почти таким же, как в начальный момент моделирования. Для данных молекул $T_t = 1$ (см. [4]). Хотя в головной части потока результаты моделирования отличаются от аналитического решения в виде ВР [1], они подобны для рассматриваемых моментов времени (см. рис. 1). Можно ожидать хотя бы приближенную автомодельность течения. Это легко проверить, если совместить профили параметров потока, полученные для различных моментов времени, изменяя масштаб по оси абсцисс. В результате оказалось, что приближенная автомодельность имела место для моментов $t = 200, 400, 750$ для всех профилей, за исключением T_t в головной части потока. Такое отличие возникает почти одновременно с отклонением полученного при моделировании профиля скорости от

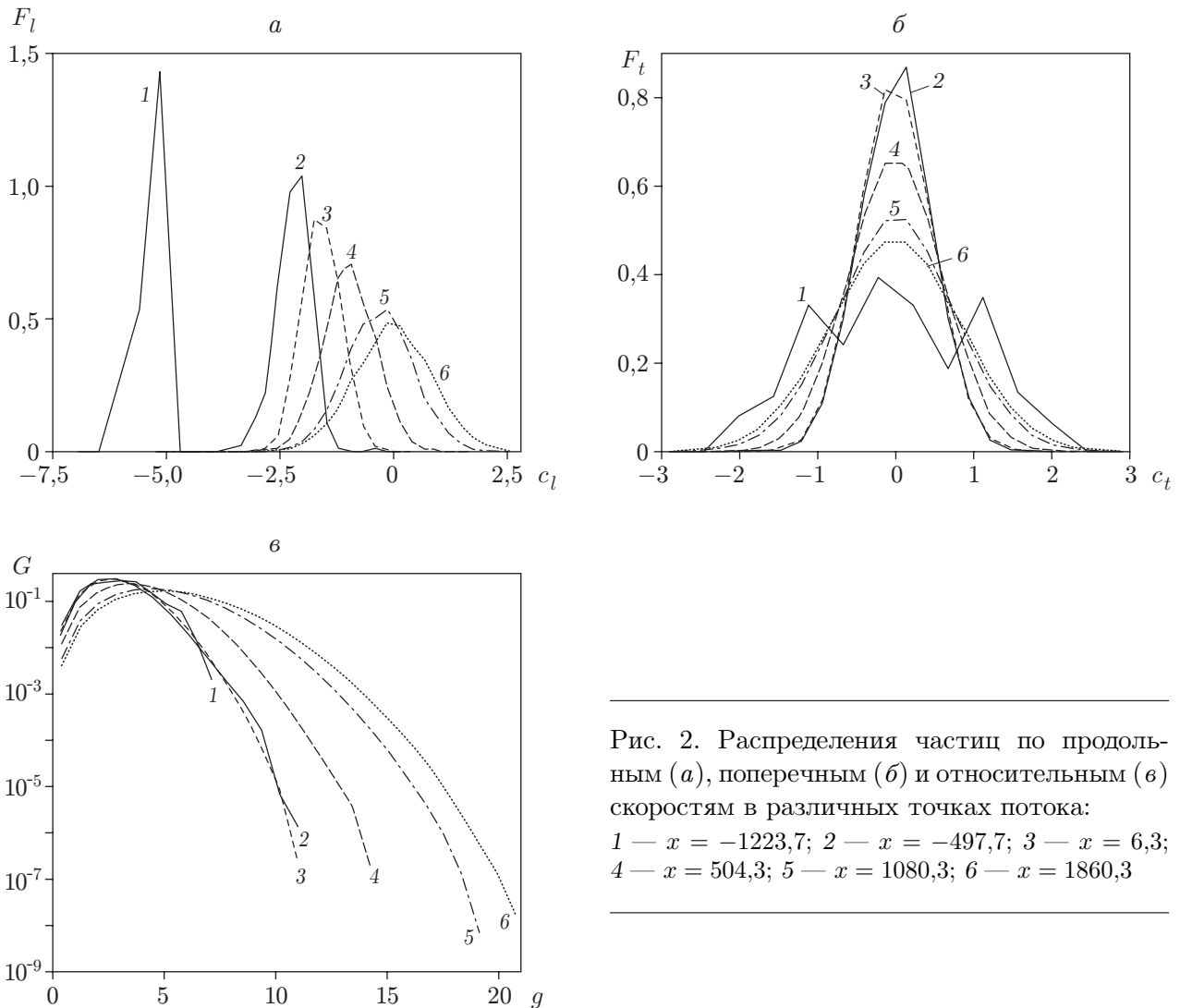


Рис. 2. Распределения частиц по продольным (а), поперечным (б) и относительным (в) скоростям в различных точках потока:

1 — $x = -1223,7$; 2 — $x = -497,7$; 3 — $x = 6,3$;
4 — $x = 504,3$; 5 — $x = 1080,3$; 6 — $x = 1860,3$

соответствующего аналитического для ВР. При этом чем меньше значение t , тем больше значения T_t при одинаковых s . Распределение продольной температуры хорошо удовлетворяет автомодельности даже в той области потока, где очень велик разброс результатов. Следовательно, несмотря на наличие такого дополнительного параметра, как время поступательной релаксации, результаты моделирования показывают, что автомодельный характер течения имеет место практически во всей области расширения потока. Это позволяет предсказывать параметры течения при временах бóльших, чем t_e , при которых было выполнено моделирование.

На рис. 2 приведены распределения по скоростям, полученные при $t = 750$ в шести точках, соответствующих характерным частям потока, иллюстрирующие переход от состояния сильного неравновесия к равновесию по поступательным степеням свободы. Точнее, распределения получены при выборках результатов моделирования в интервале времени $t = 750,0 \div 750,1$. При этом процесс выборок повторялся 20 раз, начинаясь каждый раз при состоянии потока в момент $t = 750$, но при другом начальном значении датчика случайных чисел. В данном случае скорости нормированы на скорость звука в неподвижном газе a (по сложившейся традиции), а сами распределения нормированы так, что интегралы от них по

Таблица 2

Среднеквадратичные ошибки σ_l и σ_g распределений F_l и G в ряде точек потока для нескольких скоростей, нормированных на a

x	c_l	σ_l	g	σ_g
-1223,7	-6,04	0,018	3,733	0,012
	-5,59	0,005	6,448	0,004
	-5,14	0,013	7,127	$1,5 \cdot 10^{-3}$
6,3	-1,470	0,001	2,851	10^{-4}
	-0,402	$3,5 \cdot 10^{-4}$	10,181	$6,8 \cdot 10^{-7}$
	-0,134	$2 \cdot 10^{-4}$	11,000	$1,4 \cdot 10^{-7}$
1080,3	-3,081	10^{-4}	0,407	$1,2 \cdot 10^{-5}$
	-2,817	$6 \cdot 10^{-5}$	3,665	$4,3 \cdot 10^{-5}$
	0,671	10^{-4}	14,250	$6,2 \cdot 10^{-8}$

скоростям равны единице. Ранее подпрограмма распределения скоростей применялась при моделировании стационарной ударной волны. Такая нормировка удобна для распределения по продольной скорости, так как на графике сразу видны значения средних скоростей перед фронтом волны и за ним, выраженные в числах Маха. На рис. 2,а показаны распределения F_l по продольной молекулярной скорости c_l , а на рис. 2,б — распределения F_t по поперечной (например, проекции скорости на ось y) молекулярной скорости c_t . Следует отметить отличие вида распределения от максвелловского в головной части потока (например, кривая 1 на рис. 2,а) и немонотонное изменение полуширины и высоты F_t (рис. 2,б) по мере продвижения от головной части вверх по потоку. Последнее связано с аналогичным изменением температуры T_t . Выше отмечалось, что распределение по поперечной скорости должно быть почти таким же, как и в начальный момент моделирования. Действительно, кривые 1 и б по форме близки друг к другу. Число выборок для распределения 1 очень мало, с чем и связано появление трех пиков. Если бы оно было больше, то кривая 1 была бы более гладкой и, вероятно, соответствие распределений 1 и б было бы еще лучше. На рис. 2,в приведены распределения G пар молекул по относительной скорости g . Для пары молекул величина g равна модулю разности векторов скоростей этих молекул. Ярких особенностей поведения G при этом не наблюдается. Стандартные среднеквадратичные отклонения от средних значений (ошибки) σ_l и σ_g распределений F_l и G в ряде точек потока приведены в табл. 2 при некоторых значениях скоростей c_l и g . Данные скорости выбраны так, чтобы дать представление об ошибках в центре и на “хвостах” распределений по скоростям.

Заключение. В результате решения задачи установлено, что реальная область распространения вещества и скорость (по абсолютной величине) головной части потока значительно больше, чем это следует из аналитического решения.

В головной части потока продольная, поперечная и полная кинетические температуры существенно различаются, что является следствием возникшей поступательной неравновесности. Следует отметить немонотонность профилей поперечной и полной кинетических температур.

Кроме того, результаты моделирования свидетельствуют об автомодельном характере течения во всей области расширения потока, за исключением распределений поперечной и полной кинетических температур в головной части газового потока. Это позволяет определить параметры течения при временах больших, чем те, при которых было проведено моделирование.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Гидродинамика. М.: Наука, 1986.
2. Морозов А. А., Плотников М. Ю., Ребров А. К. Столкновение сверхзвуковых потоков в вакууме в затопленном пространстве // ПМТФ. 1999. Т. 40, № 4. С. 44–50.
3. Морозов А. А., Плотников М. Ю., Ребров А. К. Сравнение различных подходов при моделировании столкновений сверхзвуковых потоков // Мат. моделирование. 2000. Т. 12, № 5. С. 67–73.
4. Лукьянов Г. А. Нестационарное истечение пара в вакуум от плоской поверхности // Теплофизика и аэромеханика. 2004. Т. 11, № 1. С. 63–77.
5. Генич А. П., Куликов С. В., Манелис Г. Б. и др. Приложение весовых схем статистического моделирования течений многокомпонентного газа к расчету структуры ударной волны // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 1986. Т. 26, № 12. С. 1839–1854.
6. Генич А. П., Куликов С. В., Манелис Г. Б., Черешнев С. Л. Поступательная релаксация в ударных волнах в газах. Черногловка, 1991. (Препр. / АН СССР. Ин-т хим. физики).
7. Куликов С. В., Соловьева М. Е. Об эффективности статистического моделирования ударной волны в газовой смеси // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 1988. Т. 28, № 12. С. 1867–1873.
8. Берд Г. Молекулярная газовая динамика. М.: Мир, 1981.

*Поступила в редакцию 7/IV 2005 г.,
в окончательном варианте — 2/IX 2005 г.*
