
МАТЕМАТИЧЕСКАЯ
ФИЗИКА

УДК 519.635

Посвящается профессору Евгению Михайловичу Шахову в связи с его 90-летием

ЧИСЛЕННЫЙ И ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ МОДЕЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ ДЛЯ МНОГОКОМПОНЕНТНОГО РАЗРЕЖЕННОГО ГАЗА

© 2023 г. А. А. Фролова^{1,*}

¹19333 Москва, ул. Вавилова, 44, корп. 2, ФИЦИУ РАН, Россия

*e-mail: aafrolova@yandex.ru

Поступила в редакцию 15.06.2023 г.

Переработанный вариант 14.07.2023 г.

Принята к публикации 22.08.2023 г.

Исследуются модельные уравнения, аппроксимирующие систему уравнений Больцмана для многокомпонентного газа. Анализируются методы определения параметров в релаксационных членах, соответствующих интегралам перекрестных столкновений. Проводится численное сравнение решений с использованием трех модельных систем и уравнений Больцмана на примере следующих задач: релаксация смеси к равновесию, задача о структуре ударной волны и определение динамики парогазового облака, вызванного импульсным лазерным облучением вещества мишени. Показано влияние параметров в релаксационных операторах на степень отличия решений при использовании различных моделей. Библ. 25. Табл. 2. Фиг. 3.

Ключевые слова: кинетическое уравнение, модельные уравнения, законы сохранения, многокомпонентный газ, нестационарные задачи.

DOI: 10.31857/S0044466923120128, **EDN:** TBGJZG

1. ВВЕДЕНИЕ

Физические процессы, подлежащие изучению, становятся все более сложными и многообразными, что связано с уменьшением размеров используемых устройств и изучением сильно неравновесных процессов. Важными факторами становятся учет различных форм внутренней энергии молекул, учет состава изучаемого газа, явлений ионизации и кластеризации. В этом случае кинетический подход является одним из основных инструментов исследования. В силу большой трудоемкости прямого интегрирования точного уравнения Больцмана (УБ) наиболее часто численные подходы основываются на прямом статистическом методе (ПСМ) или на использовании альтернативных подходов на основе модельных кинетических уравнений. Однако создание модельных уравнений для описания течения, например, многокомпонентного газа, вызывает трудности при аппроксимации УБ.

Если для однокомпонентного газа разработанные модельные уравнения [1–3] в определенных режимах течения показали свою эффективность, подтвержденную многочисленными расчетами Е.М. Шахова и его коллег (см., например, [4–7]), то для многокомпонентного газа пока не удалось получить аппроксимацию системы УБ, приводящую в гидродинамическом пределе к одновременно всем правильным коэффициентам переноса (Фика, Соре, Дюфура, Фурье и Ньютона). Кроме этого, многие модели разработаны для бинарных смесей максвелловских молекул, и вопрос о применимости их для любого количества компонент и любых законов взаимодействия молекул остается открытым.

Первая модель типа БГК (Бхатнагара–Гросса–Крука) для смесей была представлена в 1956 г. [8] и с тех пор была модифицирована во многих работах, опубликованных с 60-х годов прошлого столетия по настоящее время (см., например, [9–20]). Предложенные к настоящему времени модели представляют в основном два типа приближения системы УБ. К первому типу относятся модели, аппроксимирующие все интегралы столкновений каждой компоненты одним релаксационным оператором (односкоростные релаксационные модели) [13–15, 20], а ко второму – мо-

дельные уравнения, в которых каждый интеграл столкновений аппроксимируется отдельно (многоскоростные релаксационные модели) [10, 11, 17].

В работе [17] представлены положения, определяющие корректность модельных уравнений для приближения системы УБ, которые включают в себя три условия: а) выполнение законов сохранения, б) доказательство Н-теоремы и в) единственность равновесного решения. Кроме этого, в работе [12] было указано еще на необходимость выполнения для модельных уравнений условия неразличимости (indifferentiability), означающего, что в случае смеси, состоящей из механически эквивалентных молекул (с равными массами и сечениями столкновений), сумма функций распределения по скоростям компонент смеси удовлетворяет уравнению Больцмана для одной компоненты. Однако, как показано в работе [17], это свойство может быть выполнено, если интеграл столкновений молекул одного вида и интегралы перекрестных столкновений аппроксимируются одновременно одним релаксационным членом. Таким образом, многоскоростные релаксационные модели, сохраняющие структуру системы УБ, не могут удовлетворять условию неразличимости в отличие от односкоростных релаксационных моделей. Насколько важно это свойство, можно определить, только проводя сравнение соответствующих решений.

Отметим также, что для многих предложенных моделей не представлен сравнительный анализ с решениями по УБ, и поэтому вопрос об их пригодности для расчетов остается открытым. Цель данной работы — провести численное и теоретическое сравнение моделей [13, 15, 17], относящихся к разным типам построения, с решением по УБ с целью выбора наиболее корректной аппроксимации для моделирования разлета парогозового облака, вызванного коротко импульсным лазерным облучением вещества мишени. Отметим, что для всех рассматриваемых моделей доказаны Н-теорема, выполнение законов сохранения и существование единственного равновесного решения.

2. СИСТЕМА УРАВНЕНИЙ БОЛЬЦМАНА ДЛЯ МНОГОКОМПОНЕНТНОГО ГАЗА

Для многокомпонентного газа система уравнений Больцмана имеет вид

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + (\xi, \nabla_r f_i) = Q_{ii}(f_i, f_i) + \sum_{j \neq i}^N Q_{ij}(f_i, f_j) = Q_i(\mathbf{f}, \mathbf{f}), \quad i = 1, \dots, N, \quad (2.1)$$

где $Q_{ii}(f_i, f_i)$ — интегралы самостолкновений (столкновений молекул одного вида), $Q_{ij}(f_i, f_j)$ — интегралы перекрестных столкновений (столкновений молекул разных видов) [21]. Система (2.1) определяет эволюцию функций распределения $f_i(\mathbf{r}, \xi, t)$, зависящих от вектора координат $\mathbf{r} = (x, y, z)$ физического пространства, вектора скоростей $\xi = (\xi_x, \xi_y, \xi_z)$ и времени t . Макропараметры каждой компоненты, плотность числа частиц n_i , вектор скорости $\mathbf{u}_i$ и температура T_i определяются по функции распределения соотношениями

$$(n_i, n_i \mathbf{u}_i, 3k_B n_i T_i)' = \int f_i(\xi) (1, \xi, m_i |\xi - \mathbf{u}_i|^2) d\xi,$$

а глобальные макропараметры всей смеси, плотность числа частиц n , массовая плотность ρ , средняя скорость $\mathbf{u}$ и температура T по макропараметрам компонент следующим образом:

$$n = \sum_{i=1}^{i=N} n_i, \quad \rho = \sum_{i=1}^{i=N} m_i n_i, \quad \mathbf{u} = \sum_{i=1}^{i=N} m_i n_i \mathbf{u}_i / \rho,$$

$$3nk_B T + \rho \mathbf{u}^2 = \sum_{i=1}^{i=N} (3n_i k_B T_i + m_i n_i \mathbf{u}_i^2).$$

Для системы (2.1) выполняются законы: а) сохранения числа частиц, суммарного импульса и суммарной энергии [21]

$$\langle Q_i, 1 \rangle = 0, \quad i = 1, \dots, N; \quad \sum_{i=1}^{i=N} m_i \langle Q_i, \xi \rangle = 0; \quad \sum_{i=1}^{i=N} m_i \langle Q_i, \xi^2 \rangle = 0,$$

б) Н-теорема

$$\sum_{i=1}^{i=N} \langle Q_i, \log(f_i) \rangle \leq 0$$

и в) существование единственного равновесного решения $f_i = n_i M(\xi, \mathbf{u}, T/m_i)$ при $Q_i = 0$, $i = 1, \dots, N$. Здесь использованы обозначения для интеграла по скоростному пространству $\langle f, h \rangle = \int f(\xi) h(\xi) d\xi$ и для функции Максвелла $M(\xi, \mathbf{u}, T/m) = (2\pi k_B T/m)^{-3/2} e^{-m(\xi - \mathbf{u})^2 / (2k_B T)}$. Для корректного приближения (2.1) системой модельных уравнений необходимо, чтобы указанные свойства также были выполнены.

При построении модельных уравнений используются различные виды релаксационных операторов, которые можно записать в виде

$$\tilde{Q}_{ij} = v_{ij} (n_i G_{ij}(\mathbf{u}_{ij}, T_{ij}) - f_i),$$

где вектор скорости $\mathbf{u}_{ij}$, температура T_{ij} и частота столкновений v_{ij} — параметры, подлежащие определению. В случае модельных уравнений типа БГК $G_{ij}(\mathbf{u}_{ij}, T_{ij})$ является функцией Максвелла. Если рассматриваются эллипсоидально-статистические модели, то функция G_{ij} представляет собой эллипсоидальную функцию, зависящую от вектора скорости $\mathbf{u}_{ij}$, температуры T_{ij} и тензора напряжений каждой компоненты [2] или всей смеси [15].

Так как число законов сохранения меньше числа свободных параметров, то определение в функции G_{ij} вектора скорости и температуры представляет основную проблему при замене системы УБ модельными уравнениями. Параметры в релаксационных членах $\tilde{Q}_{ii}$ можно определить из законов сохранения числа частиц, импульса и энергии для каждой компоненты

$$\langle \tilde{Q}_{ii}, \Psi(\xi) \rangle = 0, \quad \Psi(\xi) = (1, m_i \xi, m_i \xi^2)^t,$$

а определение $\mathbf{u}_{ij}, T_{ij}$ в релаксационных членах, соответствующих перекрестным интегралам столкновений, возможно, например, из соотношений

$$m_i \langle \tilde{Q}_{ij}, \xi \rangle + m_j \langle \tilde{Q}_{ji}, \xi \rangle = 0, \quad m_i \langle \tilde{Q}_{ij}, \xi^2 \rangle + m_j \langle \tilde{Q}_{ji}, \xi^2 \rangle = 0,$$

но с дополнительными условиями [14]. Различные дополнительные условия приводят к разным модельным уравнениям.

Часто макропараметры в $\tilde{Q}_{ij}$ определяются из равенства моментов интегралов перекрестных столкновений и их модельных аналогов [10, 11, 13, 17]

$$\langle (\tilde{Q}_{ij} - Q_{ij}), \xi \rangle = 0, \quad \langle (\tilde{Q}_{ij} - Q_{ij}), \xi^2 \rangle = 0.$$

В случае максвелловских молекул (с потенциалом взаимодействия $U_{ij}(r) = \frac{\alpha_{ij}}{r^p}$, $p = 4$) моменты первого и второго порядков имеют вид [9, 10]:

$$\int m_i \xi Q_{ij} d\xi = 2\mu_{ij} \chi_{ij} n_i n_j (\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_i), \quad (2.2)$$

$$\int m_i (\xi - \mathbf{u}_i)^2 Q_{ij} d\xi = 4\mu_{ij} \chi_{ij} n_i n_j \frac{1}{(m_i + m_j)} \left[3k_B (T_j - T_i) + m_j |\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_i|^2 \right], \quad (2.3)$$

где $\mu_{ij} = m_i m_j / (m_i + m_j)$ — приведенная масса.

Соотношения (2.2), (2.3) для максвелловских молекул являются точными, и χ_{ij} является величиной, зависящей от масс молекул и не зависящей от температур. Для потенциалов взаимодействия с произвольным показателем p соотношения (2.2), (2.3) могут быть записаны в таком же виде, если $(\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_i)^2 / (k_B T_j / m_j + k_B T_i / m_i) \ll 1$, и функции распределения близки к равновесным.

Значения коэффициентов χ_{ij} для потенциалов центрального поля приведены в [9], а в случае закона взаимодействия молекул по закону твердых сфер (с диаметром d) имеют вид

$$\chi_{ij} = \frac{4}{3} \sqrt{2\pi k_B T_i / m_i + 2\pi k_B T_j / m_j} (d_i + d_j)^2 / 4. \quad (2.4)$$

3. МОДЕЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ ДЛЯ МНОГОКОМПОНЕНТНОГО ГАЗА

Рассмотрим сначала модельные уравнения, которые при определении макропараметров в релаксационных членах используют равенства (2.2), (2.3). К таким моделям относятся модель ААР [13], (Андриес, Аоки, Пертхаме) и ВВГСП [17] (Бобылев, Бизи, Гроппи, Спига, Потапенко). Данные модельные уравнения имеют разную структуру и используют различные предположения.

Модельные уравнения ААР представляют собой односкоростную релаксационную модель, при условии, что $\mathbf{u}_{ij} = \mathbf{U}_i$, $T_{ij} = \bar{T}_i$, $v_{ij} = v_i$, приближают $Q_i = \sum_{j=1}^N Q_{ij}$ одним релаксационным оператором вида

$$\tilde{Q}_i = v_i (n_i M(\xi, \mathbf{U}_i, \bar{T}_i / m_i) - f_i)$$

с общей температурой $\bar{T}_i$ и вектором скорости $\mathbf{U}_i$. Из (2.2), (2.3) макропараметры $\mathbf{U}_i$ и $\bar{T}_i$ определяются следующими формулами:

$$\mathbf{U}_i = \mathbf{u}_i + \sum_{j=1}^{j=N} \alpha_{ij} (\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_i), \quad \alpha_{ij} = 2 \frac{\chi_{ij} n_j m_j}{v_i (m_i + m_j)},$$

$$3k_B \bar{T}_i = 3k_B T_i - m_i (\mathbf{U}_i - \mathbf{u}_i)^2 + \sum_{j=1}^{j=N} 2\alpha_{ij} m_i / (m_j + m_i) \left[3k_B (T_j - T_i) + m_j |\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_i|^2 \right],$$

а частота столкновений v_i , полагается равной $v_i = \sum_{j=1}^{j=N} \chi_{ij} n_j$, что гарантирует положительность температуры. Данная модель помимо основных свойств (а—в) удовлетворяет также условию неразличимости [13].

Модельные уравнения ВВГСП представляют собой многоскоростную релаксационную модель $\tilde{Q}_i = \sum_{j=1}^N \tilde{Q}_{ij}$, где $\tilde{Q}_{ij}$ задаются в виде

$$\tilde{Q}_{ij} = v_{ij} (n_i M(\xi, \mathbf{U}_{ij}, \bar{T}_{ij} / m_i) - f_i).$$

Здесь скорости $\mathbf{U}_{ij}$ и температура $\bar{T}_{ij}$ находятся из соотношений (2.2), (2.3) для каждой компоненты смеси отдельно:

$$\mathbf{U}_{ij} = (1 - \alpha_{ij}) \mathbf{u}_i + \alpha_{ij} \mathbf{u}_j,$$

$$\bar{T}_{ij} = (1 - b_{ij}) T_i + b_{ij} T_j + \gamma_{ij} |\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j|^2, \quad i, j = 1, \dots, N,$$

где

$$\alpha_{ij} = 2 \frac{\chi_{ij} n_j m_j}{v_{ij} (m_i + m_j)}, \quad b_{ij} = \frac{2\alpha_{ij} m_i}{(m_i + m_j)}, \quad \gamma_{ij} = \frac{\alpha_{ij} m_i}{3} \left[\frac{2m_j}{(m_i + m_j)} - \alpha_{ij} \right].$$

Величина v_{ij} является свободным параметром. Если положить $v_{ij} = 2\chi_{ij} n_j$, то получатся соотношения

$$\mathbf{U}_{ij} = (m_i \mathbf{u}_i + m_j \mathbf{u}_j) / (m_i + m_j),$$

$$\bar{T}_{ij} = T_i + \frac{2\mu_{ij}}{(m_i + m_j)} (T_j - T_i + m_j |\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j|^2 / (3k_B)),$$

которые использовались для бинарной смеси в [8, 10, 11]. При $v_{ij} = \chi_{ij} n_j$ (которое будет использоваться в наших расчетах) будем иметь следующие соотношения:

$$U_{ij} = [(m_i u_i + m_j u_j) + m_j (u_j - u_i)] / (m_i + m_j),$$

$$\bar{T}_{ij} = T_i + \frac{4\mu_{ij}}{(m_i + m_j)} (T_j - T_i).$$

Частота в модельном члене $\tilde{Q}_{ii}$ определяется, как и в случае однокомпонентного газа [1]. Отметим, что модельные уравнения VBGSP не удовлетворяют условию неразличимости [17].

Обе эти модели относятся к БГК типу и в континуальном режиме не дают правильного значения для числа Прандтля.

Для коррекции числа Прандтля Pr предложены различные формы эллипсоидально-статистической модели (см., например, [2, 15, 20]), отличающиеся параметрами в эллипсоидальной функции G^{ES} .

Мы рассмотрим односкоростную релаксационную модель ESBGK (Брулл) [15, 22], имеющую следующий вид $\tilde{Q}_i = v (G_i^{ES} - f_i)$. В этой модели полагается равенство векторов скорости и температуры в релаксационных функциях глобальным макропараметрам смеси, т.е. $u_{ij} = u$, $T_{ij} = T$, и частота столкновений полагается одинаковой для всех компонент смеси $v_{ij} = v$. Функции G_i^{ES} представляются в виде

$$G_i^{ES} = \frac{n_i}{\sqrt{\det(A)}} \left(\frac{m_i}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{m_i \mathbf{c}^T A^{-1} \mathbf{c}}{2k_B T} \right),$$

где анизотропная матрица $A = I - \frac{1 - \alpha Pr}{\alpha Pr} \left(\frac{P}{k_B n T} - I \right)$ определяется по тензору напряжения P :

$$P = \sum_{i=1}^N m_i \int f_i (\xi - u) \otimes (\xi - u) d\xi.$$

Здесь I — единичная матрица, $\mathbf{c} = \xi - u$ — собственная скорость частиц, $\alpha = \sum \frac{m n_i}{n m_i}$, $m = \sum m_i n_i / n$.

На основании разложения Чепмена—Энского модельных уравнений и сопоставления с уравнениями Навье—Стокса частота столкновений v определяется по глобальным переменным следующим образом [15]:

$$v = \frac{n k_B T}{\mu} \alpha Pr,$$

где μ — коэффициент вязкости смеси. Число Прандтля смеси $Pr = c_p \mu / K$ находится по коэффициенту теплопроводности K и удельной теплоемкости $c_p = 5k_B / (2m)$. Коэффициенты вязкости и теплопроводности могут быть определены по правилу смешения Уилки [22], которое и используется в наших расчетах.

Особенность данной модели состоит в том, что функция в релаксационном операторе не зависит от состояния отдельных компонент, а определяется по макропараметрам всей смеси. Данное предположение может сужать область применения такого подхода до задач, рассматривающих течения, близкие к равновесию. Однако достоинствами модели являются выполнение условия неразличимости и возможность в континуальном пределе получить правильное отношение коэффициента вязкости к коэффициенту теплопроводности.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННЫХ РАСЧЕТОВ

Расчеты для сравнения описанных выше моделей проводятся в безразмерных величинах, определяемых по характерным параметрам: длины L , температуры T_{ref} , массы m_0 и диаметра d_0

Таблица 1. Параметры трехкомпонентной смеси и отличия скорости и температуры от решения по УБ при релаксации к равновесию

Газы	m_i	n_i	u_{xi}	T_i	$\delta_u, \%$ AAP	$\delta_u, \%$ ESBGK	$\delta_T, \%$ AAP	$\delta_T, \%$ ESBGK
Kr	1.0	0.5	1.0	1.0	0.1	0.9	0.6	0.1
Ar	0.48	0.3	0.0	2.0	0.4	1.4	0.8	3.5
Ne	0.24	0.2	0.5	0.5	0.3	4.0	4.1	10

Таблица 2. Параметры двухкомпонентной смеси и отличия скорости и температуры от решения по УБ при релаксации к равновесию

Газы	m_i	n_i	u_{xi}	T_i	$\delta_u, \%$ AAP	$\delta_u, \%$ ESBGK	$\delta_T, \%$ AAP	$\delta_T, \%$ ESBGK
Ne	1.0	0.1	1.0	0.2	16.0	>100	4.2	72
He	0.2	0.9	-1.0	0.2	6.0	50	3.4	12

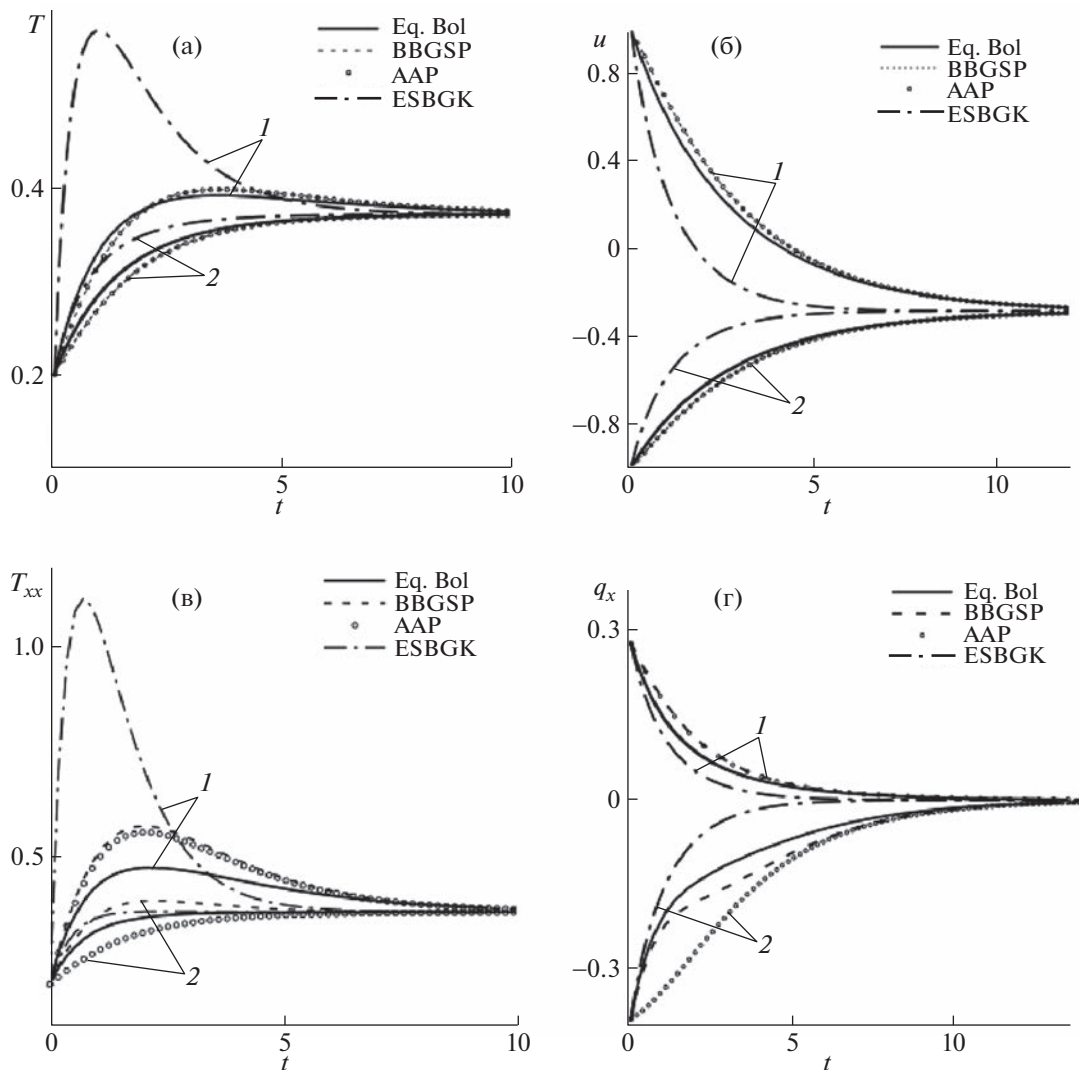
самой тяжелой компоненты, наиболее вероятной скорости молекул $u_0 = \sqrt{2k_B T_{\text{ref}}/m_0}$ и плотности числа частиц n_{ref} . Вычисления осуществляются на основе программного комплекса UFS [23], где в кинетический блок добавлены алгоритмы расчетов рассматриваемых модельных уравнений. Для вычисления интеграла столкновений применяется метод, предложенный в [24], основанный на двухточечном проектировании энергии частиц после столкновений на равномерную кубическую сетку в импульсном пространстве. Для численного решения УБ используется метод расщепления на свободно молекулярный этап и этап релаксации. Для уравнения переноса применяется метод конечных объемов с реконструкцией функции распределения на грани с использованием ограничителя потоков minmod.

Для сравнения численных решений модельных уравнений и УБ рассмотрим первоначально задачу о релаксации к равновесию трех- и двухкомпонентной смеси. Данные сравнения показывают, насколько правильно были заданы коэффициенты χ_{ij} и параметры в моделях.

Тест 1. Задача об однородной релаксации. Постановка данной задачи предполагает отсутствие зависимости функции распределения от координат физического пространства, и определению подлежат скорости релаксации к равновесию макропараметров каждой компоненты. Функции распределения в начальный момент задаются в виде функций Максвелла $f_i(\xi, t=0) = n_i M(\xi, \mathbf{u}_i, T_i/m_i)$, параметры которых приведены в табл. 1, 2, при этом компоненты скорости u_{yi} и u_{zi} равны нулю, а диаметры молекул в данных расчетах считаются равными.

Расчеты релаксации трех компонент показали, что профили температуры, скорости, теплового потока и компоненты тензора вязких напряжений, полученные по моделям AAP и BBGSP, практически совпадают и близки к решению по УБ. Модель ESBGK дает большее отличие. Максимальные относительные отклонения $\delta_f = \max_i |f_M - f_B|/f_B$, где нижние индексы М, Б, обозначают расчет с использованием модельных уравнений и УБ соответственно, приведены в табл. 1.

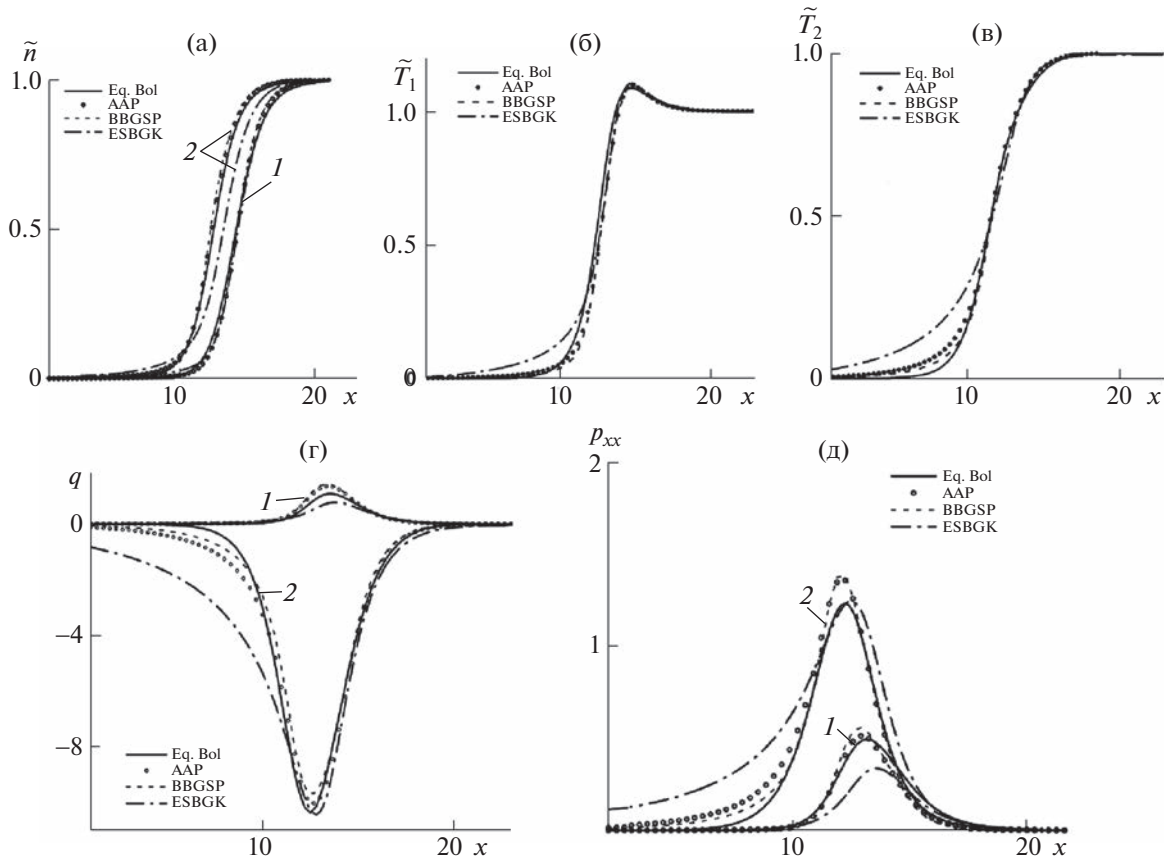
Во втором варианте начальные скорости и температуры (см. табл. 2) выбраны так, что условие $(\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_i)^2 / (k_B T_j/m_j + k_B T_i/m_i) \ll 1$ не выполняется, и использованное соотношение (2.4) для величины χ_{ij} становится несправедливым. Кроме этого, данные начальные условия соответствуют сильно неравновесному режиму. Как видно из фиг. 1а, б, результаты расчетов по моделям AAP и BBGSP качественно согласуются с результатами, полученными с помощью кинетического уравнения Больцмана. Тогда как относительные отклонения макропараметров для модели ESBGK (см. табл. 2) достигают более 100% из-за всплеска температуры и слишком быстрой релаксации скорости вследствие использования в функции G_i^{ES} единых глобальных макропараметров и одинаковой частоты столкновений для всех компонент. Отметим, что профили теплового потока и продольной температуры (фиг. 1в, г) для всех модельных уравнений имеют существенные отличия от результатов, полученных решением УБ.



Фиг. 1. Релаксация двух компонент с отношением масс $m_1 : m_2 = 5$, (а) температура, (б) скорость, (в) продольная температура, (г) тепловой поток, цифрами 1, 2 обозначены профили макропараметров Ne и He соответственно.

Тест 2. Задача о структуре ударной волны. Рассматривается ударная волна для смеси двух газов со скоростью набегающего потока с числом Маха $M = 3$ и отношением масс компонент $m_1 : m_2 = 5$ (Ne, He). Диаметры атомов разных компонент предполагаются равными $d_1 = d_2 = d_0$. Безразмерные плотности числа частиц компонент до ударной волны $n_1 = 0.1$, $n_2 = 0.9$. Число Кнудсена $Kn = \lambda/L = 1$, длина свободного пробега λ задается в расчете, как $\lambda = 1/(n_{ref} d_0^2 \pi \sqrt{2})$, где n_{ref} — плотность числа частиц газовой смеси до ударной волны.

На фиг. 2а–в показаны нормированные значения плотностей и температур $\tilde{s}_i = (s - s_{ia}) / (s_{ib} - s_{ia})$, где s_{ia} , s_{ib} — макропараметры до и после ударной волны соответственно. И как видно из фиг. 2а, б, профили плотности и температуры Ne (тяжелой компоненты), полученные по моделям AAP, BBGSP, хорошо воспроизводят решение по УБ, а температурные профили He (легкой компоненты) (фиг. 2в) имеют отличия. Результаты расчета по эллипсоидально-статистической модели для всех приведенных макропараметров имеют значительные отклонения от результатов расчета по УБ, подъем температуры перед фронтом ударной волны выражен сильнее, чем дают модели AAP и BBGSP, а профиль плотности He имеет сдвиг вправо.



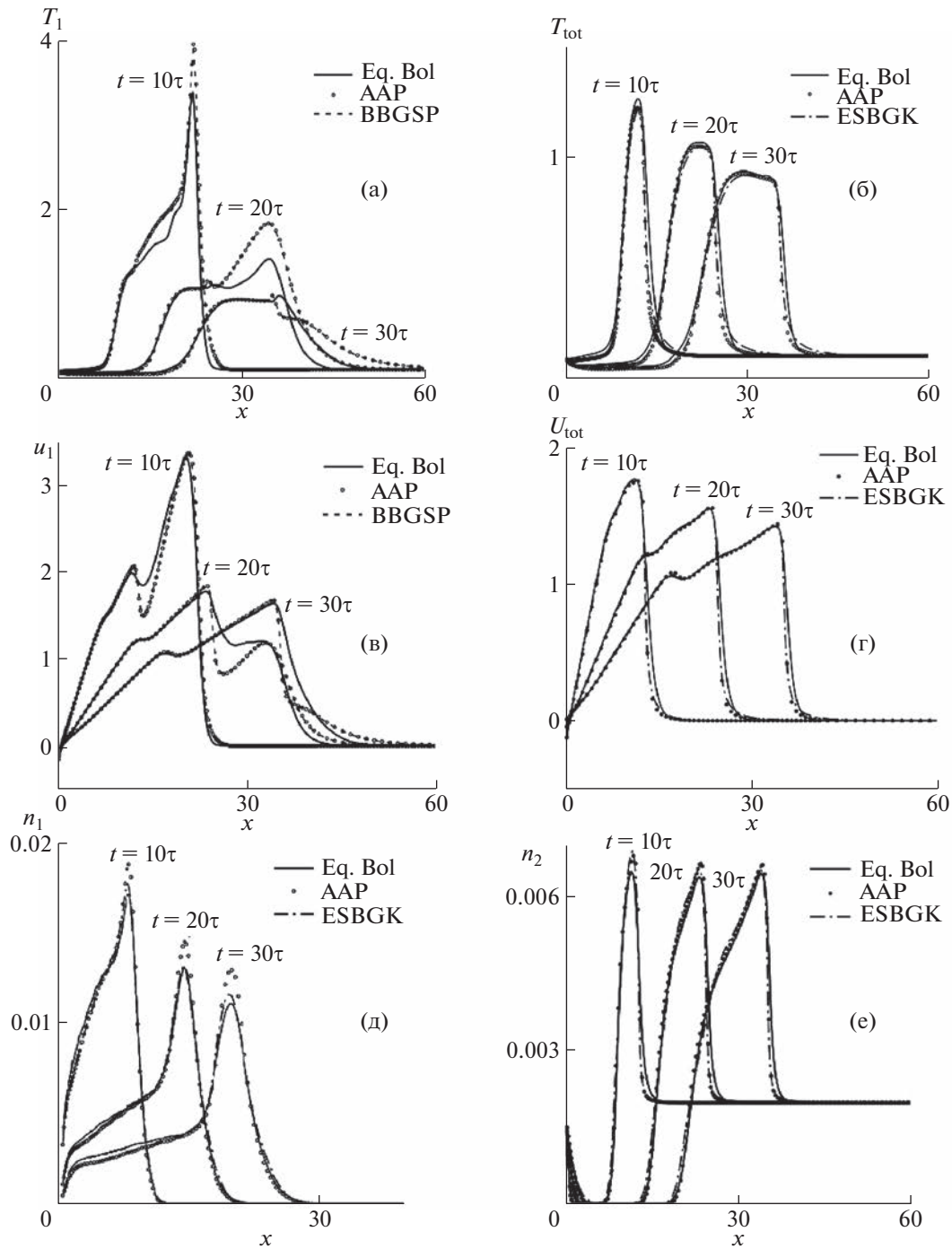
Фиг. 2. Структура ударной волны с числом Маха $M = 3$, отношением масс $m_1 : m_2 = 5$, (а) плотность, (б) температура Ne , (в) температура Ne , (г) тепловой поток, (д) продольная компонента тензора вязких напряжений, цифрами 1, 2 обозначены профили макропараметров Ne и Ne соответственно.

Отметим, что задача о структуре ударной волны соответствует режиму сильной неравновесности, и отклонения решений модельных уравнений от решений УБ являются закономерными. Тепловой поток и компонента тензора вязких напряжения также имеют существенные отличия перед фронтом ударной волны (фиг. 2г, д), при этом важно, что экстремальные значения теплового потока воспроизводятся модельными уравнениями удовлетворительно.

Тест 3. Определение динамики пароговзого облака при испарении в фоновый газ. Рассматривается одномерный разлет (при $x > 0$) пароговзого облака в фоновый газ, соответствующий начальной стадии испарения, вызванного импульсным лазерным облучением мишени радиуса R . Температуры поверхности и фоновго газа равны 3000 и 300 К соответственно. Отношение массы атомов мишени к массе атомов фоновго газа $m_1 : m_2 = 2$. Число Кнудсена $Kn = \lambda/R = 0.001$, безразмерное время действия лазера $\tau_0 = 0.5$, что соответствует ~ 25 монослоям испаряющихся частиц [25]. Безразмерные значения плотности и температуры испаряющегося газа на границе области при $x = 0$ и $t < \tau_0$ равны $n_1 = 1$, $T_1 = 1$. При $t > \tau_0$ предполагается полное поглощение обратного потока частиц, т.е. $n_1 = 0$. Плотность и температура фоновго газа при $x = 0$ задаются, соответственно, $n_2 = 0.002$, $T_2 = 0.1$. Граничные условия для функций распределения имеют следующий вид:

$$f_1(x = 0, \xi_x > 0, t) = \begin{cases} n_1 M(\xi, \mathbf{u}_1 = \mathbf{0}, T_1/m_1), & t < \tau_0, \\ 0, & t \geq \tau_0, \end{cases}$$

$$f_2(x = 0, \xi_x > 0, t) = n_2 M(\xi, \mathbf{u}_2 = \mathbf{0}, T_2/m_2).$$



Фиг. 3. Разлет парогазового облака в фоновый газ в разные моменты времени. (а), (в) температура и скорость тяжелой компоненты, (б), (г) глобальные температура и скорость смеси, (д), (е) плотность числа частиц тяжелой и легкой компоненты соответственно.

При $x > 0$ и $t = 0$ плотности числа частиц атомов мишени и фоновый газ полагаются равными $n_1 = 10^{-10}$ (моделирование вакуума) и $n_2 = 0.002$, температуры обоих газов $T_1 = T_2 = 0.1$. Начальные условия для функций распределения задаются следующим образом:

$$f_i(x > 0, \xi, t = 0) = n_i M(\xi, \mathbf{u}_i = \mathbf{0}, T_i/m_i), \quad i = 1, 2.$$

Проведенные расчеты показали, что поведение скорости и температуры легкой компоненты близко к поведению глобальных значений скорости и температуры. При этом макропараметры, полученные решением УБ, хорошо воспроизводятся решением модельных уравнений (см. фиг. 3б, г). Профили скорости и температуры тяжелой компоненты (см. фиг. 3а, в) имеют отличия на фронте волны для моделей ААР и ВВГСП и качественно другое поведение при расчете по модели ESBGK (график не приводится), что связано с неравновесным режимом течения пара в этой области. Поведение плотности числа частиц для обоих компонент удовлетворительно согласуется с решением УБ для модели ESBGK, тогда как модели ААР и ВВГСП дают отличия в экстремальных точках (фиг. 3д, е).

Сравнение значений макропараметров, полученных с использованием моделей ААР и ВВГСП, показывает, что эти модели дают очень близкие результаты. Максимальные относительные отклонения скорости и температуры не превышают 2%. Такие же близкие результаты сохраняются и при равных массах молекул, а также при рассмотрении трехкомпонентной смеси. Таким образом, условие неразличимости не является важным фактором при решении рассмотренных задач, в отличие от использования в релаксационных членах хотя и приближенных макропараметров, но описывающих состояние каждой компоненты. Решение с применением ESBGK модели из-за использования глобальных макропараметров и единой частоты столкновений для обоих компонент показывает отличие решений для каждой компоненты, но для всей смеси дает решение, близкое к решению по УБ.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Были проведены численные сравнения трех кинетических релаксационных систем для моделирования течения многокомпонентного газа. Были рассмотрены как односкоростные модели (ААР и ESBGK), так и многоскоростная ВВГСП. Расчеты показали, что модели ААР и ВВГСП дают решения, удовлетворительно согласующиеся с решениями, полученными по уравнению Больцмана и близкие между собой, несмотря на то, что данные модели относятся к разным типам построения. Общее для этих моделей свойство, — использование моментных следствий интегралов перекрестных столкновений для определения макропараметров в релаксационных членах, позволяет более точно воспроизводить результаты уравнения Больцмана для каждой компоненты. Эллипсоидальная модель, дающая правильное число Прандтля, в приведенных примерах дает большее отклонение, а в некоторых случаях приводит к ложному поведению температуры. Данное отклонение от решения по УБ возникает из-за отсутствия учета динамики каждой компоненты и использования частоты столкновений единой для всей смеси. Возможно, данная модель окажется более точной при режимах, близких к континуальным, что будет исследовано в дальнейшем. Численные расчеты программным комплексом UFS проводились на вычислительных ресурсах Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Шахов Е.М. Обобщение релаксационного кинетического уравнения Крука // Изв. АН СССР. МЖГ. 1968. № 5. С. 142–145.
2. Holway L.H. New statistical models for kinetic theory: Methods of construction // Phys. Fluids. 1966. V. 9. P. 1658.
3. Larina I.N., Rykov V.A. Nonlinear nonequilibrium kinetic model of the Boltzmann equation for monatomic gases // Comput. Math. Math. Phys. 2011. V. 51. № 11. P. 1962–1972.
4. Konopel'ko N.A., Shakhov E.M. Evolution to a steady state for rarefied gas flowing from a tank into a vacuum through a plane channel // Comput. Math. Math. Phys. 2017. V. 57. № 10. P. 1695–1705.
5. Konopel'ko N.A., Titarev V.A., Shakhov E.M. Unsteady rarefied gas flow in a microchannel driven by a pressure difference // Comput. Math. Math. Phys. 2016. V. 56. № 3. P. 470–482.
6. Titarev V.A., Shakhov E.M. Efficient method for computing rarefied gas flow in a long finite plane channel // Comput. Math. Math. Phys. 2012. V. 52. № 2. P. 269–284.
7. Шахов Е.М. Течение разреженного газа между коаксиальными цилиндрами под действием градиента давления // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2003. Т. 43. № 7. С. 1107–1116.
8. Gross E.P., Krook M. Model for collision processes in gases: small amplitude oscillations of charged two-component systems // Phys. Rev. 1956. V. 102. № 3. P. 593–604.
9. Goldman E., Sirovich L. Equations for gas mixtures // Phys. Fluids. 1967. V. 10. № 9. P. 1928–1940.
10. Morse T.F. Kinetic model equations for a gas mixture // Phys. Fluids. 1964. V. 7. № 12. P. 2012–2013.
11. Hamel B.B. Kinetic model for binary gas mixtures // Phys. Fluids. 1965. V. 8. № 3. P. 418–425.

12. *Garzo V., Santos A., Brey J.J.* A kinetic model for a multicomponent gas // *Phys. Fluids A* . 1989. V. 1. № 2. P. 380–383.
13. *Andries P., Aoki K., Perthame B.* A consistent BGK-type model for gas Mixtures // *J. Stat. Phys.* 2002. V. 106. № 5. P. 993–1018.
14. *Groppi M., Monica S., Spiga G.* // A kinetic ellipsoidal BGK model for a binary gas mixture // *Europhys. Lett.* 2011. V. 96. № 6. P. 64002.
15. *Brull S.* An ellipsoidal statistical model for gas mixtures // *Commun. Math. Sci.* 2014. V. P. 1–13.
16. *Kosugo S.* Model Boltzmann equation for gas mixtures: Construction and numerical comparison // *Eur. J. Mech – B Fluids Mechanics B/Fluids*. 2009. V. 28. P. 170–184.
17. *Bobylev A.V., Bisi M., Groppi M., Spiga G., Potapenko I.F.* A general consistent BGK model for gas mixtures // *Kinetic Related Models*. 2018. V. 11. № 6. P. 1377–1393.
18. *Haack J.R., Hauck C.D., Murillo M.S.* A conservative, entropic multispecies BGK model // *J. Stat. Phys.* 2017. V. 168. № 4. P. 826–856.
19. *Klingenberg C., Pirner M., Puppo G.* A consistent kinetic model for a two component mixture with an application to plasma // *Kinetic Related Models*. 2017. V. 10. № 2. P. 445–465.
20. *Todorova B., Steijl R.* Derivation and numerical comparison of Shakhov and Ellipsoidal Statistical kinetic models for a monoatomic gas mixture // *Europ. J. Mech. B/Fluids*. 2019. V. 76. P. 390–402.
21. *Коган М.Н.* Динамика разреженного газа. М.: Наука, 1967.
22. *Pfeiffer M., Mirza A., Nizenkov P.* Multi-species modeling in the particle-based ellipsoidal statistical Bhatnagar-Gross-Krook method for monatomic gas species// *Physics of Fluids* 2021. V. 33. №. 3. P. 036106.
23. *Kolobov V., Arslanbekov R., Aristov V., Frolova A., Zabelok S.* Unified solver for rarefied and continuum flows with adaptive mesh and algorithm refinement // *J. Comput. Phys.* 2007. V. 223. P. 589–608.
24. *Черемусин Ф.Г.* Консервативный метод вычисления интеграла столкновений Больцмана // *Докл. АН* 1997. Т. 35. № 1. С. 1–4.
25. *Морозов А.А., Фролова А.А., Тумарев В.А.* On different kinetic approaches for computing planar gas expansion under pulsed evaporation into vacuum // *Physics of Fluids*. 2020. V. 32. С. 112005.