

24. Сафарян М. Н., Скребков О. В. О классическом (диффузионном и квантовомеханическом) методах расчета кинетики VV -обмена и радиационной дезактивации двухатомных молекул.— М., 1975.— (Препринт/Ин-т проблем механики АН СССР, № 56).
25. Сафарян М. Н., Скребков О. В. Сравнение результатов классического диффузионного и квантового расчетов колебательно-поступательной релаксации двухатомных молекул // ПМТФ.— 1978.— № 4.
26. Биберман Л. М., Воробьев В. С., Якубов П. Т. Кинетика ударно-радиационной ионизации и рекомбинации // УФН.— 1972.— Т. 107, вып. 3.
27. Волохов В. М., Скребков О. В. О классическом диффузионном и квантовом расчетах колебательной релаксации в бинарной смеси двухатомных молекул — ангармонических осцилляторов // Хим. физика.— 1984.— Т. 3, № 2.
28. Никитин Е. Е., Осипов А. И. Колебательная релаксация в газах // Итоги науки и техники. Сер. Кинетика и катализ.— М.: ВИНТИ, 1977.— Т. 4.
29. Гельфонд А. О. Исчисление конечных разностей.— М.: Наука, 1967.
30. Бирюков А. С., Гордиец Б. Ф. Кинетические уравнения релаксации колебательной энергии в смеси многоатомных газов // ПМТФ.— 1972.— № 6.
31. Ступоченко Е. В., Лосев С. А., Осипов А. И. Релаксационные процессы в ударных волнах.— М.: Наука, 1965.

Поступила 10/XI 1985 г.

УДК 531

КВАЗИСТАЦИОНАРНАЯ РЕЛАКСАЦИЯ И ГАЗОДИНАМИЧЕСКИЕ ЯВЛЕНИЯ В ОДНОКОМПОНЕНТНОЙ СИСТЕМЕ ВОЗБУЖДЕННЫХ АНГАРМОНИЧЕСКИХ ОСЦИЛЛЯТОРОВ

В. П. Силаков, А. В. Чеботарев

(Москва)

В настоящее время кинетическая теория колебательной релаксации молекулярных газов — наиболее разработанный раздел физической кинетики. К важным достижениям теории следует отнести разработку общих методов описания сильно неравновесных систем [1, 2]. В таких случаях ангармонизм колебаний молекул оказывает существенное влияние на поведение среды. До сих пор теоретический анализ колебательной релаксации системы ангармонических осцилляторов проводился в основном для неподвижных газов.

Вместе с тем интенсивное развитие физики неравновесных разрядных явлений показало, что корректное описание поведения сильно возбужденных газов должно учитывать их релаксационное движение. В самом деле, например, такое движение может заметно повлиять на условия колебательной релаксации газа в послеразрядный период [3], а в быстропроточных разрядных установках привести к срыву режима накачки колебательных степеней свободы газовых смесей [4]. Для теоретического рассмотрения выделенного класса задач требуется выполнение существенного объема вычислительных работ, связанных с решением большого числа уравнений колебательной кинетики. Чтобы уменьшить указанные трудности, необходимо выделить простую и достаточно надежную модель процесса.

Наиболее экономичная модель, описывающая колебательную релаксацию молекулярных газов в широком диапазоне изменения параметров, — это квазистационарная модель колебательной релаксации ангармонических осцилляторов, предложенная в [5] (последовательное изложение основ модели приводится в [1]). Большим достоинством модели является то, что исходя из сравнительно простых уравнений для макроскопических величин она позволяет получить достаточно детальную информацию о состоянии газа в течение всего процесса релаксации. Однако в работе [6], посвященной исследованию нагрева колебательно-возбужденного азота, утверждается, что результаты расчетов, проводимых в рамках квазистационарной модели, должны сильно отличаться от соответствующих результатов нестационарной кинетической теории. Возможность такого отличия результатов в случае сильно неравновесных состояний газа в [6] связывается с большим вкладом в нагрев нерезонансных процессов VV -обмена между ангармоническими осцилляторами на начальной стадии релаксации, когда происходит формирование функций распределения молекул по колебательным уровням. Наши предварительные расчеты показали нестрогость сделанного утверждения. Кроме того, в [7] использование квазистационарной теории и последних данных по частотам VV - и VT -обменов (см. [8]) обеспечило удовлетворительное описание поведения колебательно-неравновесного азота в послеразрядный период. Таким образом, необходимо непосредственное сопоставление квазистационарной и нестационарной кинетических моделей релаксации системы возбужденных ангармонических осцилляторов.

Ниже рассматривается возможность использования квазистационарной модели колебательной релаксации для описания динамической релаксации неравновесных

газов двухатомных молекул. Дан анализ и сделана коррекция аналитических соотношений макроскопической формы этой модели. Проведено сравнение результатов, получаемых в рамках квазистационарной и нестационарной кинетических моделей. Для демонстрации применимости квазистационарной модели к расчетам динамики движения неравновесных газов рассмотрена задача об усилении слабой ударной волны в колебательно-возбужденном азоте.

В дальнейшем правильность описания процессов релаксации будем контролировать расчетами, проводимыми в рамках достаточно точной модели нестационарной поуровневой кинетики (МНПК). В случае изохорической или изобарической релаксации однокомпонентной системы уравнения МНПК, учитывающие наиболее важные одноквантовые переходы, имеют вид [1, 6]

$$(1) \quad df_i/dt = \pi_{i+1} - \pi_i, \quad i = 0, 1, \dots, i_*$$

Здесь $f_i = N_i/N$; N_i — число молекул в единице объема на i -м колебательном уровне; N — полное число молекул в единице объема;

$\pi_{i+1} = Z \left[P_{i+1,i} f_{i+1} - P_{i,i+1} f_i + \sum_{k=0}^{i_*} (Q_{i+1,i}^{k,k+1} f_{i+1} f_k - Q_{i,i+1}^{k+1,k} f_i f_{k+1}) \right]$; Z — частота столкновений молекулы; $P_{i,i+1}$ и $P_{i+1,i}$ — вероятности переходов молекулы ($i \rightarrow i+1$) и ($i+1 \rightarrow i$) при столкновении с другой молекулой; $Q_{i+1,i}^{k,k+1}$ и $Q_{i,i+1}^{k+1,k}$ — вероятности VV -обменов ($k \rightarrow k+1$) и ($k+1 \rightarrow k$) при столкновении двух молекул; i_* — номер последнего учитываемого колебательного уровня (определяется из условия заведомого пренебрежения возбуждениями с $i > i_*$).

Если вклад нерезонансных VV -процессов в релаксацию незначительный, то в квазистационарном приближении решение уравнений (1) представляется зависимостью [1]

$$(2) \quad f_i \approx \begin{cases} f_i^{(1)}, & i < n_0, \\ f_i^{(2)}, & n_0 \leq i \leq n_1, \\ 0, & i > n_1, \end{cases}$$

где $f_i^{(1)} = f_0 \exp \left[-i \left(\frac{E_1}{kT_1} - (i-1) \frac{\Delta E}{kT} \right) \right]$ — нижняя ветвь распределения Тринора [9]; $f_i^{(2)} = C \{ 1 - B [\exp(i\delta_{VT}) - \exp(n_0\delta_{VT})] / C \} / (i+1)$; $n_0 = \frac{E_1}{2\Delta E} \frac{T}{T_1} + 0,5$ — колебательное квантовое число, соответствующее

минимуму распределения Тринора; $n_1 = n_0 + \delta_{VT}^{-1} \ln \left[1 + (n_0 + 1) \frac{F_T}{B} \times \exp(-n_0\delta_{VT} - 0,5) \right]$; $F_T = f_0 \exp \left(-\frac{E_1}{kT} \right)$ — значение функции распределения Тринора при $i = n_0$; f_0 — нормировочный множитель; $B = \frac{P_{10}}{Q_{10}} \frac{12\Delta E \delta_{VT}^3}{12\Delta E \delta_{VT}}$; $C = \exp(-0,5)(n_0 + 1)F_T$; $Q_{10} \equiv Q_{10}^{01}$; E_1 — энергия возбуждения первого колебательного уровня; ΔE — постоянная ангармонизма; δ_{VT} и δ_{VV} — параметры, определяющие частоты VT - и VV -процессов; T_1 — колебательная «температура» первого колебательного уровня; T — температура газа.

Среднее число колебательных квантов, приходящихся на одну молекулу, и скорость изменения этого числа находятся из соотношений

$$(3) \quad S^{(f)} = \frac{1}{\hbar\omega_0} \sum_i E_i f_i;$$

$$(4) \quad \left(\frac{dS}{dt} \right)^{(f)} = \frac{1}{\hbar\omega_0} \sum_i E_i (\Pi_{i+1} - \Pi_i).$$

Здесь индекс f означает, что соответствующие величины вычисляются с использованием явной функции распределения; $\hbar\omega_0$ — энергия колеба-

тельного кванта; E_i — энергия возбуждения i -го колебательного уровня осциллятора; $\Pi_i = Z(P_{i,i-1}f_i - P_{i-1,i}f_{i-1})$ — поток молекул с i -го уровня на $(i-1)$ -й, обусловленный VT -процессами. Функция распределения (2) и соотношения (3), (4) составляют основу квазистационарной модели релаксации (КМР).

Приближенное суммирование в (3) и (4) с функцией (2) приводит к результату (см. [1], гл. 4, § 5):

$$S^{(f)} \approx S_M \text{ и } \left(\frac{dS}{dt}\right)^{(f)} \approx \left(\frac{dS}{dt}\right)_M,$$

где

$$(5) \quad S_M = S_{M1} + S_{M2};$$

$$(5a) \quad S_{M1} = \left[\exp\left(\frac{E_i}{kT_1}\right) - 1 \right]^{-1};$$

$$(5b) \quad S_{M2} = \exp(-0,5)(n_0 + 1)(n_1 - n_0)F_T;$$

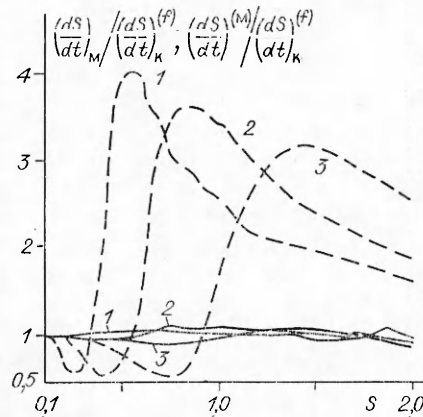
$$(6) \quad \left(\frac{dS}{dt}\right)_M = \left(\frac{dS}{dt}\right)_{M1} + \left(\frac{dS}{dt}\right)_{M2};$$

$$(6a) \quad \left(\frac{dS}{dt}\right)_{M1} = -ZP_{10} \frac{[1 - \exp(-E_1/kT_1)] [\exp(-E_1/kT_1) - \exp(-E_1/kT)]}{[1 - \exp(-E_1/kT_1 + \delta_{VT})]^2};$$

$$(6b) \quad \left(\frac{dS}{dt}\right)_{M2} = -ZQ_{10} \left(\frac{6}{e}\right) \frac{\Delta E}{kT\delta_{VT}^3} [(n_0 + 1)F_T]^2;$$

индекс m означает, что рассматриваемая величина входит в набор других, определяющих макроскопическую форму квазистационарной модели релаксации (МКМР). Первые части написанных выражений показывают вклад в суммы (3) и (4) слагаемых, относящихся к уровням с квантовыми числами из интервала $0 \leq i < n_0$, а вторые — вклад слагаемых, характеризующих квантовыми числами $n_0 \leq i \leq n_1$.

В работе возможности применения макроскопической формы КМР к описанию колебательной релаксации будем иллюстрировать на примере газа из молекул N_2 . Численное сравнение формул КМР с соответствующими приближенными выражениями МКМР показывает, что они в одних и тех же случаях дают различные результаты. На рис. 1 ($1 - T = 300$, $2 - 500$, $3 - 900$ К) приводятся зависимости отношения $(dS/dt)_M / (dS/dt)_K^{(f)}$ (штриховые линии) от среднего числа колебательных квантов S (индекс k указывает на то, что вычисление рассматриваемой величины проводится с использованием функции (2)). При нахождении $(dS/dt)_M$ колебательная температура определялась из уравнения $S_M(T, T_1) = \bar{S}$, а при нахождении $(dS/dt)_K^{(f)}$ — из уравнения $S_K^{(f)}(T, T_1) = \bar{S}$. Из графика видно, что рассматриваемое отношение практически равно единице только в области слабой неравновесности газа. В областях умеренного и сильного отклонения от равновесия зависимости имеют немонотонный характер и заметно отличаются от единицы. Как увидим позднее, немонотонность в области умеренного отклонения от равновесия объясняется некорректностью замены триноровской ветви функции распределения бoльцмановским распределением при выводе формул (5а) и (6а), а завышенный результат в области сильной неравновесности — потерей сомножителя в (6 б).



Р и с. 1

При выводе более точных выражений КМР нужно учесть следующие соотношения:

$$(7) \quad \left(\frac{dS}{dt}\right)_K^{(f)} \equiv \left(\frac{dS}{dt}\right)_{K1}^{(f)} + \left(\frac{dS}{dt}\right)_{K2}^{(f)};$$

$$(7a) \quad \left(\frac{dS}{dt}\right)_{K1}^{(f)} \approx -Z \sum_{i=1}^{n_0-1} (P_{i,i-1} f_i^{(1)} - P_{i-1,i} f_{i-1}^{(1)});$$

$$(7b) \quad \left(\frac{dS}{dt}\right)_{K2}^{(f)} \approx -Z \sum_{i=n_0}^{n_1} P_{i,i-1} f_i^{(2)}.$$

В случае $n_0 \gg 1$ формула (7b) приводится к виду

$$(8) \quad \left(\frac{dS}{dt}\right)_{K2} \approx -\frac{2\delta_{VT}}{\exp(2\delta_{VT}) - 1} \left(\frac{6}{e}\right) ZQ_{10} \frac{\Delta E}{kT\delta_{VT}^3} [(n_0 + 1)F_T]^2 - \\ - ZP_{10}(n_0 + 1)F_T \frac{\exp[(n_0 - 1)\delta_{VT} - 0,5]}{\exp(\delta_{VT}) + 1} \equiv \left(\frac{dS}{dt}\right)_2^{(M)}.$$

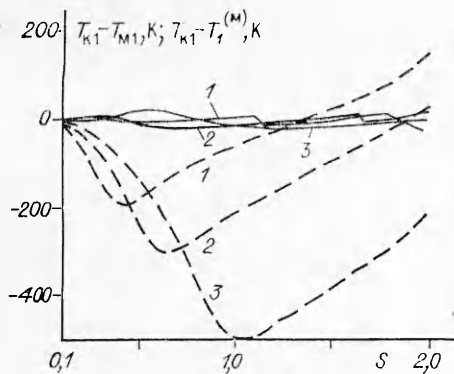
Сравнивая (8) с (6б) при сильном отклонении состояния газа от равновесия (т. е. при условии, когда в (8) можно пренебречь вторым слагаемым), видим, что $\left(\frac{dS}{dt}\right)_{M2} / \left(\frac{dS}{dt}\right)_2^{(M)} \approx \frac{\exp(2\delta_{VT}) - 1}{2\delta_{VT}}$. Для азота при низких температурах (сопоставимых комнатной) написанное отношение близко к 2.

Проанализируем, к чему может привести замена триноровской ветви функции распределения Больцмановской функцией, сделанная при выводе формулы (5а). Если принять во внимание соотношение $F_T \sim \sim \exp\left[-\left(\frac{E_1}{2kT_1}\right)^2 \frac{kT}{\Delta E}\right]$, то, согласно (8), скорость изменения колебательной энергии системы должна сильно зависеть от T_1 . При фиксированной температуре газа зависимость колебательной температуры от переменной S определяется из уравнения

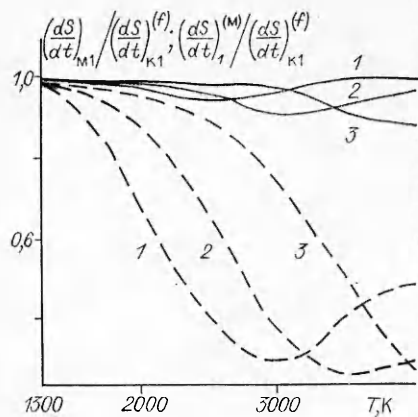
$$(9) \quad S_1(T, T_1) + S_2(T, T_1) = S.$$

Таким образом, видно, что даже малая неточность записи уравнения (9) может привести к заметной ошибке в определении $(dS/dt)^{(M)}$. На рис. 2 для температур газа (значения те же, что на рис. 1) приведены зависимости разности $T_{1K} - T_{1M}$ (штриховые линии) от S , где T_{1K} и T_{1M} — значение T_1 , найденное в рамках КМР и МКМР соответственно. График показывает, что ошибка в нахождении колебательной температуры первого уровня наибольшая в диапазоне S , отвечающих случаям умеренного отклонения состояния системы от равновесного (т. е. когда $S_{M1} \gg S_{M2}$, но $\left|\left(\frac{dS}{dt}\right)_{M2}\right| > \left|\left(\frac{dS}{dt}\right)_{M1}\right|$). Причем пики зависимостей, представленных на рис. 1 для $\left(\frac{dS}{dt}\right)_M / \left(\frac{dS}{dt}\right)_K^{(f)}$, попадают как раз в область наибольших погрешностей T_1 . В условиях сильной неравновесности отмеченный выше эффект проявляется в меньшей степени. Из сказанного следует, что использование выражения S_{M1} может внести заметную неточность в описание процесса колебательной релаксации.

Замена триноровской ветви функции распределения распределением Больцмана, сделанная при выводе аналитического выражения (6а), дает сильное занижение значений $(dS/dt)_{K1}^{(f)}$. Это наглядно иллюстрируется рис. 3, на котором для температур газа (значения те же, что на рис. 1) штриховыми линиями представлены зависимости отношения $\left(\frac{dS}{dt}\right)_{M1} / \left(\frac{dS}{dt}\right)_{K1}^{(f)}$ от T_1 . Видно, что при определении скорости колебательной релаксации слабонеравновесной системы (когда $\left|\left(\frac{dS}{dt}\right)_{M2}\right| \ll \left|\left(\frac{dS}{dt}\right)_{M1}\right|$) необходимо учитывать триноровский характер заселения нижних колебательных уровней.



Р и с. 2



Р и с. 3

Более корректное описание в рамках МКМР можно обеспечить путем аппроксимации функции f_i на участке $2 \leq i \leq n_0 - 1$. Характер аппроксимации нетрудно понять, рассматривая явный вид выражений для $S_{K1}^{(f)}$ и $(dS/dt)_{K1}^{(f)}$:

$$S_{K1}^{(f)} \approx f_0 D(a, q),$$

$$\left(\frac{dS}{dt}\right)_{K1}^{(f)} \approx -ZP_{10} \exp(-\delta_{VT}) \left\{ 1 - \exp\left[-\frac{a}{T}(T_1 - T)\right] \right\} f_0 D(a - \delta_{VT}, q),$$

где $D(a, q) = \sum_{i=1}^{n_0-1} i \exp(i^2 q) \exp[-i(a + q)]$; $a = \frac{E_1}{T_1}$; $q = \frac{\Delta E}{kT}$.

При написании последнего равенства использовалось соотношение детального равновесия $P_{i-1,i} = P_{i,i-1} \exp[-a + 2q(i-1)]$.

Для вычисления суммы D предлагается замена функции $\Phi(i) = \exp(i^2 q)$ функцией

$$(10) \quad \varphi(i) = \begin{cases} \exp(\beta i - \alpha), & 2 \leq i \leq i_0, \\ \exp(\kappa i - \gamma), & i_0 < i \leq n_0 - 1. \end{cases}$$

Здесь $i_0 = (\gamma - \alpha)/(\kappa - \beta)$; $\alpha = 2(2 + \Delta_1)q$; $\beta = (4 + \Delta_1)q$; $\gamma = (n_0 - 1)(n_0 - \Delta_2 - 1)q$; $\kappa = [2(n_0 - 1) - \Delta_2]q$. Точки пересечения зависимостей $\Phi(i)$ и $\varphi(i)$ отвечают следующим значениям переменной i : $i_{(1)} = 2$, $i_{(2)} = 2 + \Delta_1$ и $i_{(3)} = n_0 - \Delta_2 - 1$, $i_{(4)} = n_0 - 1$. В результате получим

$$(11) \quad D(a, q) \approx e^{-a} \left\{ 1 + \frac{e^{-\eta}}{(1 - e^{-\rho})^{\eta}} [e^{-\rho} (2 - e^{-\rho} - e^{-\rho i_0}) - (1 + i_0)(1 - e^{-\rho})e^{-\rho i_0}] + \frac{e^{-\xi}}{(1 - e^{-\mu})^2} [i_0(1 - e^{-\mu})(e^{-\mu} - e^{-(n_0 - i_0)\mu}) + e^{-\mu}(1 - e^{-(n_0 - i_0)\mu}) - (n_0 - i_0)(1 - e^{-\mu})e^{-(n_0 - i_0)\mu}] \right\} \equiv D^{(M)}(a, q),$$

где $\eta = (1 + \Delta_1)q$; $\rho = a - (3 + \Delta_1)q$; $\mu = a - (2n_0 - \Delta_2 - 3)q$; $\xi = (i_0 - 1)a - [i_0(2n_0 - \Delta_2 - 3) - (n_0 - 1)(n_0 - \Delta_2 - 1)]q$. При определении нормировочного множителя f_0 оказывается достаточно на интервале $2 \leq i \leq n_0 - 1$ вместо зависимости $\Phi(i)$ использовать аппроксимацию в виде функции $\exp(\beta i - \alpha)$, а на интервале $n_0 \leq i \leq n_1$ распределение $f_i^{(2)}$ заменить распределением $C/(i + 1)$. В этом случае

$$(12) \quad f_0 \approx \frac{1 - e^{-\rho}}{e^{-\alpha} (e^{-2\rho} - e^{-n_0 \rho}) + (1 - e^{-\rho}) \left[1 + e^{-\rho} + (n_0 + 1)e^{-\rho \ln\left(\frac{n_1 + 1}{n_0 + 1}\right)} \right]} \equiv f_0^{(M)}$$

($\varepsilon = qn_0^2 + 0,5$). Отметим, что применение соотношений (11) и (12) подразумевает такой набор значений параметров аппроксимации Δ_1 и Δ_2 , который позволит в широких диапазонах изменения T_1 и T для выбранного газа добиться наилучшего согласия результатов для S_1 и $(dS/dt)_1$ по формулам

$$(13) \quad S_1^{(M)} = f_0^{(M)} D^{(M)}(a, q);$$

$$(14) \quad \left(\frac{dS}{dt}\right)_1^{(M)} = -ZP_{10} \exp(-\delta_{VT}) \left\{ 1 - \exp\left[-\frac{a}{T}(T_1 - T)\right] \right\} f_0^{(M)} D^{(M)}(a - \delta_{VT}, q)$$

с аналогичными результатами расчетов, проведенных в рамках КМР.

Если говорить о параметре $S_{k2}^{(f)} = \frac{1}{\hbar\omega_0} \sum_{i=n_0}^{n_1} E_i f_i^{(2)}$, то для него получается приближенное равенство

$$(15) \quad S_{k2}^{(f)} \approx \exp(-0,5)(n_0 + 1) F_T \left\{ n_1 - n_0 + \frac{n_1 - n_0}{\exp[\delta_{VT}(n_1 - n_0)] - 1} - \frac{1}{\exp(\delta_{VT}) - 1} \right\} \equiv S_2^{(M)}.$$

В случае азота численное сравнение характерных величин для параметров Δ_1 и Δ_2 дает значения: $\Delta_1 = 1,514 + 2,79 \cdot 10^{-3} T$, $\Delta_2 = 1$. Из рис. 1—3 (сплошные линии) видно заметное повышение точности описания колебательной релаксации в рамках макроскопической формы КМР при переходе от формул (5а), (5б), (6а), (6б) к формулам (8), (11)—(15). Ниже под МКМР будет пониматься модель, основанная на использовании указанных более точных соотношений.

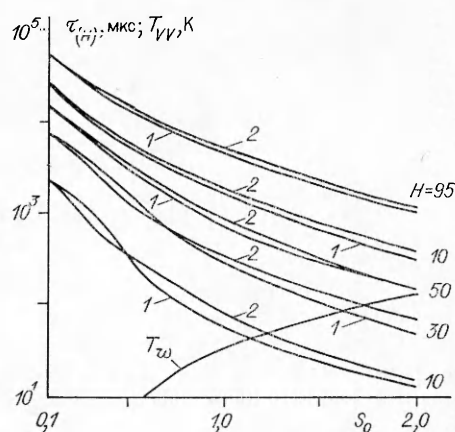
Применим МКМР к расчету изобарической релаксации колебательно-возбужденного азота и сравним результаты с аналогичными, полученными в рамках МНПК. При решении задачи в рамках МНПК уравнения (1) дополняются соотношением $\sum_i E_i f_i = \hbar\omega_0 S$ и уравнением баланса энергии

$$(16) \quad 3,5kT + \hbar\omega_0 S = 3,5kT_0 + \hbar\omega_0 S_0$$

(S_0 и T_0 — начальные значения параметров S и T). Описанная система уравнений интегрировалась численно (при условии, что $i_* = 50$) с помощью алгоритма решения жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений, приведенного в [10]. Исследование колебательной релаксации в рамках МКМР проводилось на основе уравнений $\frac{dS}{dt} = \left(\frac{dS}{dt}\right)_1^{(M)} + \left(\frac{dS}{dt}\right)_2^{(M)}$, (16) и $S_1^{(M)}(T, T_1) + S_2^{(M)}(T, T_1) = S$. В обеих моделях использованы температурные зависимости $Q_{10}(T) = 3 \cdot 10^{-7} T$ [8] и $P_{10}(T) = A \exp(-bT^{-1/3}) + GT^g$ [7], где $A = 2,24 \cdot 10^4$, $b = 308,5$, $G = 4,02 \cdot 10^{-15}$, $g = 2,474$ (зависимость $P_{10}(T)$ написана для температурного интервала $300 \text{ K} \leq T \leq 4000 \text{ K}$), и δ_{VT} , δ_{VV} задавались выражениями из [1].

Решение уравнений МНПК проводилось с различными начальными функциями распределения. Причем брались только такие функции, которые обеспечивали рассредоточение колебательной энергии на нижних уровнях. Вычисления, сделанные для условий $300 \text{ K} \leq T \leq 2000 \text{ K}$ и $S_0 \leq 2,0$, показали, что вид начального распределения практически не сказывается на характере зависимостей $S(t)$ и $T(t)$. Такой результат объясняется быстрым протеканием процессов VV -обмена, которые обеспечивают перестройку начального распределения и за характерное время τ_{VV} приводят газ в состояние с квазистационарной функцией распределения. В процессе перестройки происходит заселение верхних колебательных уровней (приводящее к образованию у функции f_i платообразного участка). В дальнейшем через верхние уровни идет передача энергии

от колебательных степеней свободы к поступательным. Нагрев газа за счет нерезонансных VV -обменов молекул при формировании функции распределения пренебрежимо мал по сравнению с общим нагревом за счет VT -процессов. Таким образом, если вначале колебательная энергия сосредоточена на нижних уровнях (т. е. потери энергии за счет VT -столкновений малы), то независимо от характера ее распределения за время $\tau_{VV} \ll \tau_{VT}$ (τ_{VT} — характерное время VT -нагрева газа) газ должен перейти в состояние с квазистационарной функцией распределения, определяемой значениями параметров $S \approx S_0$ и $T \approx T_0$.



Р и с. 4

На рис. 4 представлены зависимости времен фиксированного энергосброса $\tau_{(H)}$ от S_0 при условиях $N_0 = 2,67 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$, $S_0 = 0,1-2,0$ ($\tau_{(H)}$ — время, за которое одной молекулой в среднем выделяется энергия $H \times 10^{-2} \hbar \omega_0 [S - S_p(T_p)]$; S_p и T_p — значения S и T , отвечающие конечному равновесному состоянию). График показывает хорошее согласие результатов, полученных в рамках МКМР и МНПК (линии 1 и 2). Наибольшее расхождение значений $\tau_{(H)}$ имеет место на начальной стадии релаксации при $0,6 \leq S_0 \leq 1,1$, однако оно не превышает 30%. В ходе релаксации различие значений, рассчитанных по обеим моделям, уменьшается. Так, при $50 \leq H \leq 70$ оно не превосходит 15%. На конечной стадии релаксации ($H = 95$) результаты совпадают с точностью до 7%. На рис. 4 приведена также зависимость полного вклада VV -процессов в нагрев газа от S_0 . Она показывает, что с увеличением начальной неравновесности вклад VV -процессов в полный нагрев растет, но не превосходит 120 К ($S_0 \leq 2,0$).

Для демонстрации возможностей МКМР при исследовании динамики движения колебательно-неравновесных молекулярных газов рассмотрим задачу о распространении слабой ударной волны в возбужденном азоте. В [11] показано, что такая волна будет усиливаться и выходить на стационарный режим самопроизвольной детонации. Точность выполняемых расчетов определим путем сопоставления их с результатами вычислений по МНПК.

Волна генерируется поршнем, начинающим в момент времени $t = 0$ равномерное движение вдоль оси x . Это движение таково, что в случае равновесного газа ему отвечала бы скорость скачка уплотнения $v_{y,v} = 1,1c_0$ (c_0 — скорость звука в равновесном невозмущенном газе). Считается, что перед фронтом ударной волны параметры возбужденного газа N_0 , T_0 и $S_0 > S_p(T_0)$ поддерживаются постоянными, а процессами диссоциации и возбуждения электронных уровней молекул можно пренебречь.

В рамках МКМР система уравнений, описывающая нестационарное движение газа с учетом обмена энергией между колебательными и поступательными степенями свободы молекул, имеет вид

$$(17) \quad \frac{\partial N}{\partial t} + \frac{\partial (Nv)}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial (Nv)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{p}{m} + Nv^2 \right) = 0,$$

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} [(e + p)v] = -N\hbar\omega_0 \left(\frac{dS}{dt} \right)^{(M)}, \quad \frac{\partial S}{\partial t} + v \frac{\partial S}{\partial x} = \left(\frac{dS}{dt} \right)^{(M)}.$$

Здесь v и $p = kNT$ — скорость и давление газа; $e = \frac{N}{2} (5kT + mv^2)$; m — масса молекулы; $\left(\frac{dS}{dt} \right)^{(M)} = \left(\frac{dS}{dt} \right)_1^{(M)} + \left(\frac{dS}{dt} \right)_2^{(M)}$.

В рамках МНПК система газодинамических уравнений представляется соотношениями

$$(18) \quad \frac{\partial N_i}{\partial t} + \frac{\partial (N_i v)}{\partial x} = N (\pi_{i+1} - \pi_i), \quad i = 0, 1, \dots, i_*,$$

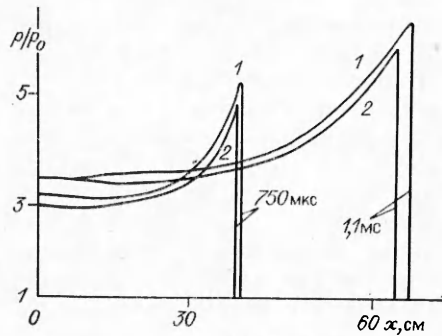
$$\frac{\partial (Nv)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{p}{m} + Nv^2 \right) = 0,$$

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} [(e + p)v] = -N \sum_{i=1}^{i_*} E_i (\pi_{i+1} - \pi_i).$$

Принятые здесь обозначения такие же, как в (1) и (17).

Уравнения (17) и (18) решались численно с помощью методики, приведенной в [12, 13]. Распространение ударной волны, созданной поршнем, в газе с параметрами $S_0 = 1$, $T_0 = 300$ К, $N_0 = 2,67 \cdot 10^{19}$ см⁻³ характеризует рис. 5, где приведен график зависимости давления от координаты в моменты времени 750 мкс и 1,1 мс (1 — МНПК, 2 — МКМР). Видно, что результаты расчетов по МКМР согласуются с результатами по МНПК с точностью до 10%. Применение в данном случае МКМР обеспечивает хорошую точность описания процесса колебательной релаксации при разумных вычислительных затратах (отношение времен численного решения уравнений (18) и (17) получилось равным примерно 500).

Авторы выражают глубокую благодарность И. А. Коссову за постоянный интерес к работе и А. П. Напартовичу за полезное обсуждение.



Р и с. 5

ЛИТЕРАТУРА

1. Гордиен Б. Ф., Осипов А. И., Шеленин Л. А. Кинетические процессы в газах и молекулярные лазеры.— М.: Наука, 1980.
2. Русанов В. Д., Фридман А. А. Физика химически активной плазмы.— М.: Наука, 1984.
3. Андреева Т. Е., Грицинин С. И. и др. Релаксация колебательно-возбужденного азота с учетом газодинамических явлений // Краткие сообщения по физике.— 1983.— № 7.
4. Веденин А. А., Дробязко С. В. и др. Влияние акустических волн, возникающих в разрядном промежутке, на работу импульсного СО₂-лазера в частотном режиме // ТВТ.— 1975.— Т. 13, № 2.
5. Гордиен Б. Ф., Мамедов Ш. С. Функция распределения и скорость релаксации колебательной энергии в системе ангармонических осцилляторов // ПМТФ.— 1974.— № 3.
6. Баиадзе К. В., Вецко В. М. и др. Аномальный нагрев азота в разряде // Физика плазмы.— 1979.— Т. 5, вып. 4.
7. Батанов Г. М., Грицинин С. И. и др. СВЧ-разряды высокого давления // Тр. ФИАН СССР.— 1985.— Т. 160.
8. Акишев Ю. С., Демьянов А. В. и др. Определение констант колебательного обмена в N₂ по нагреву газа // ТВТ.— 1982.— Т. 20, № 5.
9. Treanor C. E., Rich I. W., Rehm R. G. Vibrational relaxation of anharmonic oscillators // J. Chem. Phys.— 1968.— V. 48.
10. Захаров А. Ю., Турчанинов В. И. STIFF-программа для решения жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений // Инструкция ИПМ АН СССР.— М., 1977.
11. Рухадзе А. А., Силаков В. П., Чеботарев А. В. Распространение ударных волн в колебательно-возбужденном азоте // Краткие сообщения по физике.— 1983.— № 6.
12. Жмакин А. И., Фурсенко А. А. Об одной монотонной разностной схеме сквозного счета // ЖВММФ.— 1980.— Т. 20, № 4.
13. MacCormack R. W. The effect of viscosity in hypervelocity impact cratering.— N. Y., 1969.— (Paper/AIAA; № 69—354).

Поступила 29/VII 1986 г.