

**О ФОРМЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ АБСОЛЮТНЫХ
И ОТНОСИТЕЛЬНЫХ СКОРОСТЕЙ МОЛЕКУЛ
ВО ФРОНТЕ СИЛЬНОЙ УДАРНОЙ ВОЛНЫ.
ОДНОАТОМНЫЙ ОДНОКОМПОНЕНТНЫЙ ГАЗ**

*А. П. Генчи, Г. Г. Каспаров, Г. Б. Манелис,
Н. В. Панов
(Черноголовка)*

В гидродинамике идеальной жидкости ударная волна является геометрической поверхностью, разделяющей два термодинамически равновесных состояния среды. С молекулярно-кинетической точки зрения эта поверхность разрыва аппроксимирует переходный слой, фронт ударной волны, в котором происходит эволюция распределения скоростей молекул от одного максвелловского распределения, соответствующего газу до ударной волны, к другому, соответствующему газу позади ударной волны. Состояние газа во фронте ударной волны настолько сильно отличается от равновесного и меняется настолько быстро, что единственный приемлемый подход для описания явления — использование нелинейного уравнения Больцмана. Решение этого уравнения позволяет в принципе получить детальную информацию о неравновесной функции распределения, однако при изучении движения газа через переходный слой основное внимание уделяется не самому распределению, а вычислению средних по пространству скоростей, макроскопических величин (плотность, средняя скорость, температура).

Форма самого распределения и, в частности, форма высокоскоростного хвоста распределения становится особенно важной тогда, когда осредняются величины с пороговым характером зависимости от скорости, причем порог расположен в области скоростей, соответствующих хвосту распределения. К таким величинам относятся сечения многих химических реакций, протекание которых сопряжено с преодолением активационного потенциального барьера за счет энергии соударяющихся молекул. Поэтому выяснение особенностей релаксационного процесса во фронте сильной ударной волны может помочь в понимании роли, которую играет эта переходная область в химических превращениях, инициируемых ударными волнами.

Цель данной работы — изучить эволюцию формы распределения молекул по скоростям и пар молекул по относительным скоростям в зоне ударного скачка.

Такие исследования стали возможны лишь в последние годы в связи с интенсивным развитием численных методов [1—3].

К настоящему времени в этой области отчетливо наметились два, по-видимому, наиболее перспективных направления.

Первое из них основано на машинном моделировании рассматриваемого явления и статистическом расчете элементарных актов столкновений в модельном газе [4—6]. Среди методов, использующих этот подход, наиболее известен метод Берда [5]. Его основные достоинства за-

ключаются в сравнительно низком уровне требований к памяти ЭВМ, отсутствии ограничений на вид искомого решения и потенциала межмолекулярных сил, что позволило исследовать структуру сильной ударной волны в газе, состоящем из твердых шарообразных молекул, и получить функции распределения продольных и поперечных компонент собственных скоростей в различных точках волны с числом Маха $M = 10$.

Второе направление связано с созданием схем численного решения уравнения Больцмана. Основная трудность его решения даже для одномерного стационарного движения газа, каким является движение газа в плоской ударной волне, состоит в вычислении интегралов большой кратности. Разработанный для этой цели метод Монте-Карло [7] успешно применен к решению задачи о структуре ударной волны [8].

Удобным приемом также является построение последовательных приближений с таким подбором вида межмолекулярного потенциала, симметрии задачи и начальных условий, который позволил бы существенно снизить кратность интегралов.

Применение метода интегральных итераций [9] к задаче о структуре ударной волны в газе, состоящем из максвелловских молекул, дало возможность получить в первом приближении аналитическую форму функции распределения скоростей [10]. Несмотря на то, что сходимость последовательных приближений в общем случае не доказана, она подтверждается опытом численных решений, в которых метод интегральных итераций сочетается со статистическим способом вычисления интеграла столкновений [11].

В данной работе сопоставляются функции распределения абсолютных скоростей молекул и относительных скоростей пар молекул в ударной волне с $M = 5$, вычисленные методом прямого моделирования [5].

Рассматривается одномерная стационарная ударная волна в идеальном одноатомном газе. Дискретное описание газа осуществляется с помощью функции распределения $f(x, u_x, u_y, u_z) = f(x, \mathbf{u})$, которая определяет среднюю плотность молекул в фазовом пространстве, составленном из пространственной координаты x и трех координат скорости u_x, u_y, u_z . Предполагается, что на бесконечном расстоянии вверх и вниз по потоку газ находится в равновесном состоянии, поэтому функция распределения удовлетворяет асимптотическим (граничным) условиям

$$(1) \quad \begin{aligned} f(-\infty, \mathbf{u}) &= f_1(\mathbf{u}) = n_1 (h_1/\pi)^{3/2} \exp[-h_1(\mathbf{u} - \mathbf{U}_1)^2], \\ f(+\infty, \mathbf{u}) &= f_2(\mathbf{u}) = n_2 (h_2/\pi)^{3/2} \exp[-h_2(\mathbf{u} - \mathbf{U}_2)^2], \end{aligned}$$

где $\mathbf{U}_i = (U_i, 0, 0)$; U_1, U_2 — скорость потока перед волной и за ней соответственно. Условия в газе по обе стороны от ударной волны связаны соотношениями Ренкина—Гюгонно, представляющими законы сохранения массы, импульса и энергии

$$h_2/h_1 = 16M^2/(M^2 + 3)(5M^2 + 1), \quad n_1/n_2 = u_2'/u_1 = (M^2 + 3)/4M^2,$$

где $M = (6/5h_1)^{1/2}U_1$ — число Маха для ударной волны.

Функция распределения пар молекул по относительным скоростям определяется через функцию $f(x, \mathbf{u})$ следующим образом:

$$G(x, u_{\text{отн}}) = \int_{|v|=u_{\text{отн}}} f(x, \mathbf{u} + \mathbf{v}) f(x, \mathbf{u}) d\mathbf{u}d\mathbf{v}.$$

Непосредственным интегрированием можно убедиться, что для максвел-

ловских распределений $f_i(\mathbf{u})$

$$G_i(u_{\text{отн}}) = n_i^2 \sqrt{\frac{2}{\pi}} \tilde{n}_i^{3/2} u_{\text{отн}}^2 \exp\left(-\frac{\tilde{n}_i}{2} u_{\text{отн}}^2\right).$$

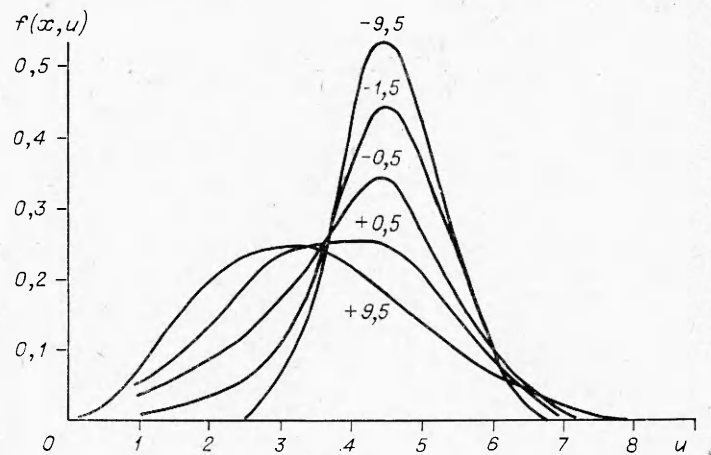
Метод прямого моделирования [5] используется для численной статистической имитации уравнения Больцмана с помощью расчета движения нескольких тысяч молекул, моделирующих одномерную стационарную ударную волну в газе. Поле моделируемого течения разделяется на пространственные ячейки, достаточно малые по сравнению с масштабом, на котором происходят изменения в потоке. Граничные условия (1) устанавливаются на концах отрезка $[-x_0, x_0]$.

В начальный момент времени молекулы с распределением по скоростям, соответствующим функции $f_1(\mathbf{u})$, равномерно размещены по ячейкам на отрезке $[-x_0, 0]$. В этот момент в поток вводится зеркально отражающий плоский поршень с рабочей поверхностью, перпендикулярной направлению потока, который начинает двигаться из точки $x = 0$ к точке $x = x_0$ со скоростью U_2 . Эволюция такой системы за время Δt , которое выбирается малым в сравнении с локальным средним временем между столкновениями, разбивается на два этапа. На первом этапе изменяются только скорости молекул в ячейках за счет столкновений в течение времени Δt . На втором этапе происходит смещение молекул в соответствии с интервалом времени Δt и их мгновенными скоростями. Столкновения между молекулами в каждой ячейке трактуются статистически, а траектории молекул между столкновениями вычисляются точно.

Интервал времени, за который поршень достигает границы вниз по потоку от центра, достаточен для установления стационарного профиля ударной волны. Затем могут быть измерены требующиеся свойства потока. Метод дает численное решение уравнения Больцмана [12], точность которого увеличивается с уменьшением временного интервала Δt , уменьшением размера ячеек и увеличением числа моделируемых молекул в каждой ячейке.

В принятой нами реализации метода использована молекулярная модель упругих шаров; длина ячейки равна средней длине свободного пробега молекул вверх по потоку λ_1 ; полное число ячеек на отрезке $[-x_0, x_0]$ равно 30—40; начальное число молекул полагалось равным 300—400; конечное число молекул на отрезке $[-x_0, x_0]$ 1500—2000. Время Δt вычисляется в процессе работы программы следующим образом. После окончания очередного цикла из m перемещений для каждой из ячеек, находящихся слева от поршня, вычисляется средняя относительная скорость молекул $u_{\text{отн}}$. Среднее время между столкновениями t_c получается путем усреднения по всем ячейкам слева от поршня величины $(\pi a^2 n u_{\text{отн}})^{-1}$, где a — диаметр молекул; n — плотность молекул в данной ячейке. Величина Δt принимается равной t_c/m . Число m обычно полагалось равным 5. Скорости после столкновений вычислялись в соответствии с алгоритмом [4]. Чтобы уменьшить статистический разброс, производилось усреднение нескольких замеров функции распределения (обычно 4—6), которые выполнялись после того, как поршень оказывался в точке x_0 . Замеры производились через интервал времени t_c . Вся процедура движения поршня повторялась до 20 раз. Вычисления выполнены на ЭВМ БЭСМ-6.

На фиг. 1 сопоставляются функции распределения молекул по скоростям $f(x, u)$ в различных точках фронта ударной волны. Функции распределения нормированы так, что $\int f(x, u) du = 1$. Цифра над каждой кривой обозначает координату x/λ_1 , к которой относится функция распределения. Знак — относится к области перед ударной волной, а знак



Фиг. 1

к области позади ударной волны. За единицу измерения скорости принята наиболее вероятная тепловая скорость молекул в невозмущенном потоке перед волной $c_1 = (1/h_1)^{1/2}$.

Вдали от центра волны вверх по потоку ($x/\lambda_1 = -9,5$) распределение близко к равновесному максвелловскому. По мере продвижения в глубь волны оно искажается за счет молекул с малыми u , которые появляются при торможении набегающего потока. Вероятность появления таких молекул заметно возрастает к центру волны, где распределение становится сильно неравновесным. За центром относительно быстро снова устанавливается максвелловское распределение.

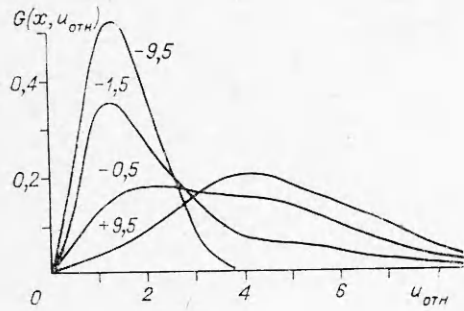
Интересно, что в процессе эволюции локальные неравновесные функции сохраняют информацию о свойствах потока вверх и вниз по течению — максимумы распределений, уменьшаясь по величине, не меняют своего положения почти до центра волны (кривые между $x/\lambda_1 = +9,5$ и $+0,5$ близки друг к другу и на фиг. 1 опущены). Это находит свое отражение в бимодальной форме распределения, похожей на распределение [13].

Неравновесная функция распределения пар молекул по относительным скоростям $G(x, u_{отн})$ представлена на фиг. 2.

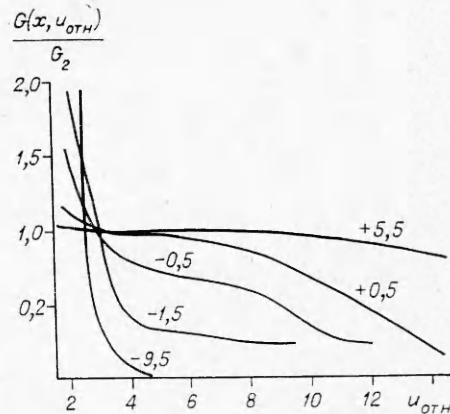
Особенность ее эволюции состоит в том, что распределение сохраняет следы бимодальности, которая проявляется в повышенной вероятности найти молекулы с большими относительными скоростями. Фиг. 3, на которой представлены отношения $G(x, u_{отн})/G_2$, иллюстрирует характер отклонения от равновесия в области средних и высоких относительных скоростей. Видно, что средние относительные скорости успевают измениться от одного равновесного значения до другого уже на нескольких длинах свободного пробега, в то время как для больших скоростей на это требуется около десяти длин.

Использованная в расчетах молекулярная модель жестких шаров является предельным случаем реальных межмолекулярных потенциалов. Более «мягкое» межмолекулярное взаимодействие будет, по-видимому, увеличивать не только общую ширину волны, но и насыщенность зоны ударного скачка молекулами с высокими относительными скоростями. Аналогичные эффекты следует, видимо, ожидать и в смесях газов с большими различиями в массах.

Значительная насыщенность зоны ударного скачка молекулами с высокими относительными скоростями может привести к тому, что во



Фиг. 2



Фиг. 3

фронте ударной волны, распространяющейся по реагирующему газу, будут эффективно протекать реакции со скоростями, значительно превосходящими скорость их протекания в нагретом газе за ударной волной. Особенно ярко это должно проявляться в процессах, носящих цепной (лавинобразный) характер, когда даже относительно малая глубина превращения в начальный момент времени (иницирование) сильно сказывается на характеристиках всего процесса.

Поступила 18 VII 1977

ЛИТЕРАТУРА

1. **Вычислительные методы в динамике разреженных газов.** Под ред. Шидловского В. П. М., «Мир», 1969.
2. **Численные методы в динамике разреженных газов.** Под ред. Рыжова О. С. М., изд. ВЦ АН СССР, 1973.
3. **Динамика разреженных газов.** Под ред. Шидловского В. П. М., «Мир», 1976.
4. **Хэвилленд Дж. К.** Решение двух задач о молекулярном течении методом Монте-Карло.— В кн.: Вычислительные методы в динамике разреженных газов. М., «Мир», 1969.
5. **Берд Дж. А.** Функция распределения скоростей в ударной волне.— В кн.: Вычислительные методы в динамике разреженных газов. М., «Мир», 1969.
6. **Белоцерковский О. М., Яницкий В. Е.** Статистический метод частиц в ячейках для решения задач динамики разреженного газа. I. Основы построения метода.— ЖВММФ, 1975, т. 15, № 5. II. Вычислительные аспекты метода.— ЖВММФ, 1975, т. 15, № 6.
7. **Нордвик А., Хикс Б. Л.** Вычисление интеграла столкновений Больцмана методом Монте-Карло.— В кн.: Вычислительные методы в динамике разреженных газов. М., «Мир», 1969.
8. **Hicks V. L., Yen S. M.** Solution of the non-linear Boltzmann equation for plane shock waves.— In: Rarefied Gas Dynamics. Proc. 6th Symp. Vol. 1. N. Y.— L., Acad. Press, 1969.
9. **Валландер С. В.** Уравнение и постановка задач в аэродинамике разреженных газов.— В кн.: Аэродинамика разреженных газов. Т. 1. Л., изд. Ленингр. ун-та, 1963.
10. **Белова А. В.** Приближенное определение параметров газа в ударной волне.— В кн.: Аэродинамика разреженных газов. Т. 1. Л., изд. Ленингр. ун-та, 1963.
11. **Черемисин Ф. Г.** Численное решение кинетического уравнения Больцмана для одномерных стационарных движений газа.— ЖВММФ, 1970, т. 10, № 3.
12. **Bird G. A.** Direct simulation and the Boltzmann equation.— «Phys. Fluids», 1970, vol. 13, N 11.
13. **Mott-Smith H. M.** The solution of the Boltzmann equation for a shock wave.— «Phys. Rev.», 1951, vol. 82, N 6, p. 885.