

УДК 533.6

ГАЗОДИНАМИЧЕСКИЕ СКАЧКИ В РЕЛАКСИРУЮЩЕМ ГАЗЕ

М. А. Рыдалевская

Санкт-Петербургский государственный университет,  
199004 Санкт-Петербург

Рассматриваются газодинамические скачки в разреженном газе из ангармонических осцилляторов. Исследуются неравновесные стационарные распределения молекул по колебательным уровням, реализующиеся за прямым скачком уплотнения в различных физических условиях.

Как известно, релаксация разных степеней свободы молекул протекает с различной скоростью. Это позволяет в ряде случаев разделить ударную волну на релаксационные зоны разной толщины [1]. На границах каждой из таких зон можно считать, что по одним степеням свободы успела пройти релаксация, а другие степени свободы заморожены.

При таком подходе обобщенные условия динамической совместности имеют вид [2]

$$\left[ \left( \rho \frac{v^2}{2} + e \right) \theta \right] = [p \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\nu}], \quad [\psi_\lambda \theta] = 0, \quad \lambda = 1, \dots, \Lambda, \quad [\rho \mathbf{v} \theta] = [p] \boldsymbol{\nu}, \quad (1)$$

где  $[\alpha] = \alpha^{(+)} - \alpha^{(-)}$ ;  $\alpha^{(-)}$  и  $\alpha^{(+)}$  — параметр  $\alpha$  до ударной волны и на границе выделенной релаксационной зоны после ударной волны;  $\rho$ ,  $\mathbf{v}$  и  $e$  — плотность, скорость и энергия единицы объема газа;  $p$  — давление;  $\boldsymbol{\nu}$  — единичный вектор нормали к поверхности сильного разрыва;  $\theta$  — скорость ее распространения;  $\psi_\lambda$  — плотность макропараметров, сохраняющихся в масштабах выделенной зоны. Для описания газодинамических течений здесь использована система определяющих макропараметров, соответствующих аддитивным инвариантам молекулярных столкновений, которые нужно учитывать на длинах порядка толщины релаксационной зоны [3–5].

В настоящей работе соотношения (1) используются для исследования неравновесных режимов колебательной релаксации химически однородного двухатомного газа, которые могут реализоваться за ударными волнами. Для простоты рассматриваются прямые скачки уплотнения.

Как известно, первыми из внутренних степеней свободы молекул возбуждаются вращательные, а затем колебательные. При этом обмены поступательной и вращательной энергией ( $TT$ -,  $RR$ - и  $RT$ -обмены) происходят значительно чаще, чем столкновения, приводящие к изменению колебательной энергии молекул. Это позволяет в ударной волне выделить зону поступательно-вращательной релаксации, когда колебательные степени свободы можно считать замороженными [1].

Исследование состояния газа за ударной волной в случае замороженных колебательных степеней свободы проводилось во многих работах. На рис. 1 приведены зависимости температуры газа  $T^{(+)}$  за ударной волной от температуры газа  $T^{(-)}$  до ударной волны при разных скоростях движения газа  $v^{(-)}$ . Расчеты проводились для кислорода в диапазоне температур  $T^{(-)} = 500 \div 1500$  К и скоростей  $v^{(-)} = 500 \div 1000$  м/с. При этом использовалась модель нежесткого колеблющегося ротатора.

Если температура газа как до, так и после ударной волны такова, что можно учитывать возбуждение лишь самых нижних колебательных

уровней молекул, то в газе хорошо действует модель гармонического осциллятора. При этом среди столкновений, приводящих к изменению колебательного состояния молекул, выделяются так называемые резонансные  $VV$ -переходы, которые происходят значительно чаще  $VT$ -переходов. Это позволяет выделить в газодинамическом скачке зону, в которой наряду с поступательно-вращательной релаксацией идет колебательная  $VV$ -релаксация, а  $VT$ -переходами пренебрегается. При этом за ударной волной устанавливается двухтемпературное больцмановское распределение. Температура газа  $T^{(+)}$  практически совпадает с температурой  $T^{(+)}$

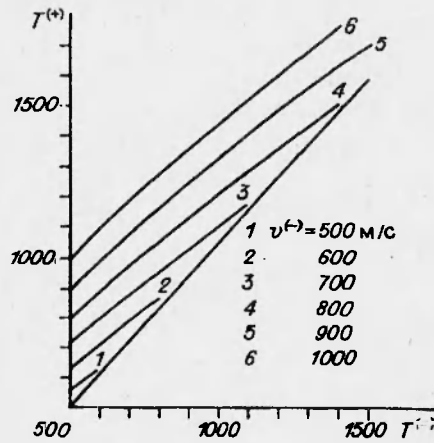


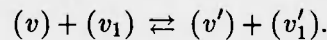
Рис. 1

при условии замороженных колебательных степеней свободы, а колебательная температура  $\bar{T}_v^{(+)}$  — с температурой газа  $T^{(-)}$ .

В условиях, когда нужно учитывать возбуждение более высоких колебательных уровней молекул, нужно использовать для них модель ангармонического осциллятора. В этом случае колебательная энергия молекулы, отсчитываемая от нулевого уровня, имеет вид

$$\begin{aligned} \varepsilon_v &= v\varepsilon_1 - \Delta\varepsilon v(v-1), & \Delta\varepsilon &= xh\nu, \\ \varepsilon_1 &= h\nu(1-2x), & x &\ll 1. \end{aligned}$$

Модель ангармонического осциллятора не является эквидистантной, поэтому при любых колебательных переходах нельзя утверждать, что колебательная энергия сталкивающихся молекул равна колебательной энергии получающихся молекул. Величина  $\Delta\tilde{\varepsilon}_{\text{vibr}} = \varepsilon_{v'} + \varepsilon_{v'_1} - \varepsilon_v - \varepsilon_{v_1}$  называется дефектом резонанса колебательного обмена



Однако и в этих условиях можно разделить по скоростям процессы релаксации колебательной энергии, что позволяет выделить зону частичной (быстрой) колебательной релаксации, на границе которой устанавливается неравновесное распределение молекул по колебательным уровням.

Определение соответствующих колебательных заселенностей и выделение системы определяющих макропараметров на границе такой зоны являются важным этапом описания неравновесных течений за ударными волнами.

Для случая, когда можно ограничиться рассмотрением нижних колебательных уровней, в ударной волне выделяется область, где наряду с поступательно-вращательными  $TT$ -,  $RR$ -,  $RT$ -обменами идут квазирезонансные одноквантовые  $VV$ -обмены, при которых сохраняется суммарное число квантов у сталкивающихся молекул. В качестве макропараметров  $\psi_\lambda$  в условия (1) входят общая числовая плотность молекул  $n$  и число квантов, накопленных в системе. При этом за ударной волной устанавливается распределение Тринора [6]. Расчеты показывают, что и в этом случае температура газа за ударной волной  $T^{(+)}$  практически не отличается от температуры  $T^{(+)}$  при условии, что колебательные степени свободы молекул заморожены, а так называемая температура 1-го колебательного уровня  $\bar{T}_1^{(+)}$  с точностью до  $10^{-3}$  К совпадает с температурой газа  $T^{(-)}$  до

ударной волны.

Как известно, распределение Гринора может использоваться лишь на нижних колебательных уровнях, ибо, начиная с некоторого уровня  $v_0$ , оно монотонно возрастает с увеличением номера  $v$ , что противоречит всем известным экспериментальным данным. Поэтому исследование заселенностей верхних колебательных уровней в релаксационных зонах за ударными волнами, как правило, проводилось путем численного или приближенного аналитического интегрирования системы дифференциальных релаксационных уравнений.

В настоящей работе изучение заселенностей всего колебательного спектра в релаксационных зонах за ударными волнами проводится путем выделения быстрых и медленных процессов, как это делалось при рассмотрении заселенностей нижних колебательных уровней. Такое выделение основывается на данных [7, 8], согласно которым можно сделать вывод, что частота колебательных переходов каждого конкретного типа определяется прежде всего отношением соответствующего дефекта резонанса к колебательной энергии сталкивающихся частиц.

Это дает основание полагать, что в определенных условиях в ударной волне можно выделить зону, где наряду с  $TT$ -,  $RR$ -,  $RT$ -переходами нужно учитывать такие колебательные переходы, при которых дефект резонанса  $\Delta\tilde{\epsilon}_{\text{vibr}}$  не превосходит доли  $\alpha$  ( $0 < \alpha < 1$ ) колебательной энергии сталкивающихся частиц. При этом можно считать, что толщина зоны имеет порядок произведения величины, обратной вероятности самого медленного из колебательных обменов с дефектом резонанса, не превосходящим доли  $\alpha$  колебательной энергии сталкивающихся частиц, на среднюю длину свободного пробега молекул. Очевидно, чем больше  $\alpha$ , тем больше толщина релаксационной зоны.

Внимательное изучение таких колебательных обменов показывает, что при  $0 < \alpha \leq 1/2$  им можно поставить в соответствие наряду с полной энергией и единицей некоторый дополнительный аддитивный инвариант молекулярных столкновений  $\psi_\alpha(v)\epsilon_1$ , причем при малых  $\alpha \in (0, 1/8]$

$$\psi_\alpha(v) = \begin{cases} \psi_\alpha(v_n(\alpha)) + (v - v_n(\alpha))(1 - n\alpha), & v \in ([v_n(\alpha), v_{n+1}(\alpha)] \cap [0, v^*(\alpha)]), \\ n = 0, 1, \dots, 1/\alpha, \\ \psi_\alpha(v^*(\alpha)), & v \in [v^*(\alpha), v_{\max}]; \end{cases} \quad (2)$$

при  $\alpha \in (\frac{1}{8}, \frac{1}{4}]$

$$\psi_\alpha(v) = \begin{cases} v, & v \in [0, \tilde{v}_1(\alpha)], \\ \psi_{\alpha/2}(v) + a(\alpha), & v \in [\tilde{v}_1(\alpha), v^*(\alpha)], \\ \psi_{\alpha/2}(v^*(\alpha)) + a(\alpha), & v \in [v^*(\alpha), v_{\max}]; \end{cases} \quad (3)$$

при сравнительно больших  $\alpha \in (\frac{1}{4}, \frac{1}{2}]$

$$\psi_\alpha(v) = \begin{cases} v, & v \in [0, \tilde{\tilde{v}}_1(\alpha)], \\ \tilde{\tilde{v}}_1(\alpha) + (v - \tilde{\tilde{v}}_1(\alpha))(1 - \alpha/4), & v \in [\tilde{\tilde{v}}_1(\alpha), \tilde{\tilde{v}}_2(\alpha)], \\ \psi_{\alpha/4}(v) + a(\alpha) + a(\alpha/2), & v \in [\tilde{\tilde{v}}_2(\alpha), v^*(\alpha)], \\ \psi_{\alpha/4}(v^*(\alpha)) + a(\alpha) + a(\alpha/2), & v \in [v^*(\alpha), v_{\max}]. \end{cases} \quad (4)$$

Во всех формулах (2)–(4)

$$v_0(\alpha) = 0, \quad \psi_\alpha(0) = 0, \quad v_n(\alpha) = \alpha \frac{\epsilon_1}{2\Delta\epsilon} \left( n - \frac{1}{2} \right) + 1,$$

$$a(\alpha) = \frac{\varepsilon_1}{2\Delta\varepsilon} \frac{\alpha^2}{32}, \quad \tilde{v}_1(\alpha) = v_1 \left( \frac{\alpha}{2} \right) + \frac{2}{\alpha} a(\alpha),$$

$$\tilde{v}_1(\alpha) = 1 + \frac{11 - 2\sqrt{3}}{32} \frac{\alpha\varepsilon_1}{2\Delta\varepsilon}, \quad \tilde{v}_2(\alpha) = 1 + \frac{10 + 2\sqrt{3}}{32} \frac{\alpha\varepsilon_1}{2\Delta\varepsilon}.$$

Значение  $v^*(\alpha)$  определяется из уравнения

$$\psi_\alpha(v_{\max}) - \psi_\alpha(v^*) \sim \alpha\psi_\alpha(v^*). \quad (5)$$

При прохождении выделенной релаксационной зоны в газе формируется следующее распределение молекул по колебательным уровням

$$n_v = \frac{n}{\tilde{Z}_{\text{vibr}}(T, T_1)} Z_{\text{rot}}^{(v)}(T) \exp \left\{ - \frac{\psi_\alpha(v)\varepsilon_1}{kT_1} + \frac{\psi_\alpha(v)\varepsilon_1 - \varepsilon_v}{kT} \right\}, \quad (6)$$

где

$$\tilde{Z}_{\text{vibr}}(T, T_1) = \sum_v Z_{\text{rot}}^{(v)}(T) \exp \left\{ - \frac{\psi_\alpha(v)\varepsilon_1}{kT_1} + \frac{\psi_\alpha(v)\varepsilon_1 - \varepsilon_v}{kT} \right\};$$

$T_1$  — температура 1-го колебательного уровня (как и в распределении Тринора);  $Z_{\text{rot}}^{(v)}(T)$  — вращательная статистическая сумма (здесь учтена связь между вращениями и колебаниями молекул).

Условия (1), записанные в симметричной форме для прямого скачка уплотнения, в этом случае примут вид

$$n^{(+)}v^{(+)} = n^{(-)}v^{(-)}, \quad \bar{\psi}_\alpha^{(+)} = \bar{\psi}_\alpha^{(-)},$$

$$\frac{v^{(+)}{}^2}{2} + \frac{5}{2} \frac{kT^{(+)}}{m} + \frac{e_{\text{rot-vibr}}^{(+)}}{m} = \frac{v^{(-)}{}^2}{2} + \frac{5}{2} \frac{kT^{(-)}}{m} + \frac{e_{\text{rot-vibr}}^{(-)}}{m},$$

$$mn^{(+)}v^{(+)}{}^2 + n^{(+)}kT^{(+)} = mn^{(-)}v^{(-)}{}^2 + n^{(-)}kT^{(-)},$$

где давление  $p = nkT$ ;  $e_{\text{rot-vibr}}$  и  $\bar{\psi}_\alpha$  — средние значения колебательно-вращательной энергии и инварианта  $\psi_\alpha(v)$ , приходящиеся на одну молекулу.

Проведенные расчеты показали, что и в этой ситуации при малых  $\alpha \in (0, 1/8]$  с точностью до  $10^{-3}$  К, а при больших  $\alpha \in (1/4, 1/2]$  с точностью до нескольких градусов температура газа совпадает с температурой газа  $T^{(+)}$  в случае замороженных колебательных степеней свободы, а  $T_1^{(+)}$  — с температурой газа  $T^{(-)}$  до ударной волны.

Из формул (2)–(6) видно, что на нижних колебательных уровнях распределение (6) совпадает с распределением Тринора, а на верхних — с распределением Больцмана при температуре газа  $T^{(+)}$ . За ударной волной, когда  $T_1^{(+)} < T^{(+)}$ , колебательные заселенности  $n_v^{(+)}(\alpha)$  интервала уровней  $[0, v^*(\alpha)]$  расположены ниже больцмановских при температуре  $T_1^{(+)} \approx T^{(-)}$ , хотя и очень близки к ним. С увеличением  $\alpha$ , согласно уравнению (5),  $v^*(\alpha)$  уменьшается. Это наглядно можно проследить на рис. 2 и 3, где приведены относительные колебательные заселенности  $x_v = n_v/n_0$ , которые можно представить в виде

$$x_v = \exp \left\{ - \frac{\varepsilon_1}{kT_1} \left( \frac{\varepsilon_v}{\varepsilon_1} - \left( \psi_\alpha(v) - \frac{\varepsilon_v}{\varepsilon_1} \right) \left( \frac{T_1}{T} - 1 \right) \right) \right\}.$$

На рис. 2 показаны относительные заселенности колебательных уровней молекул кислорода за ударной волной при одной и той же температуре газа  $T^{(-)} = 500$  К и скорости  $v^{(-)} = 1000$  м/с до ударной волны, но при разных  $\alpha$  (что соответствует разным расстояниям до фронта ударной волны).

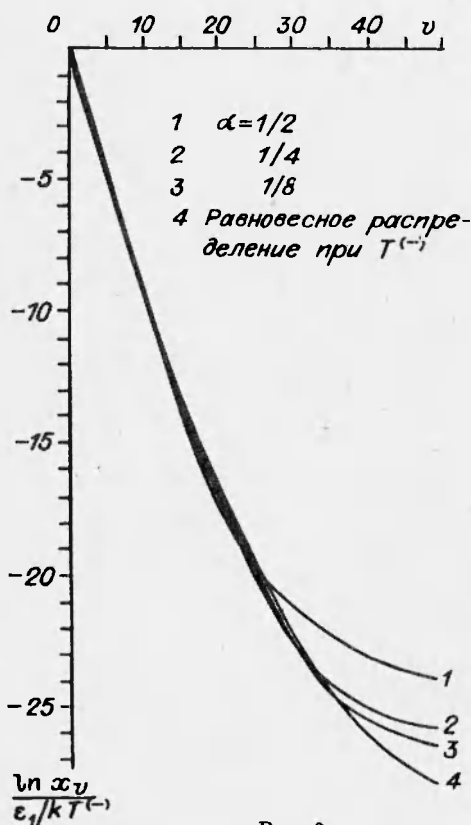


Рис. 2

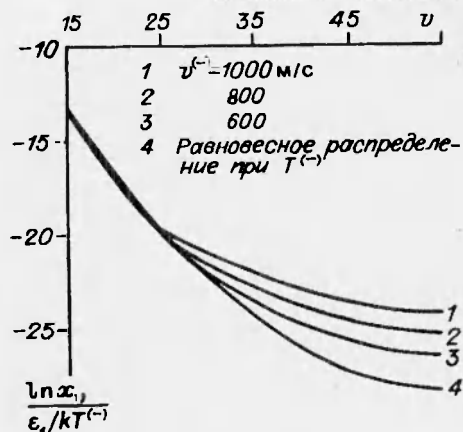


Рис. 3

Как видно из графика, до некоторого уровня  $v^*(\alpha)$  относительные заселенности колебательных уровней практически совпадают с равновесными заселенностями соответствующих уровней до ударной волны, а, начиная с уровня  $v^*(\alpha)$ , убывают значительно медленнее, как равновесные заселенности, отвечающие температуре газа  $T^{(+)}$  после ударной волны.

Чем дальше расстояние от фронта ударной волны (чем больше  $\alpha$ ), тем раньше осуществляется этот переход.

На рис. 3 изображены относительные заселенности колебательных уровней молекул кислорода за выделенной в ударной волне релаксационной зоной определенной толщины, соответствующей параметру  $\alpha = 1/2$ . При этом при одной и той же температуре газа  $T^{(-)} = 500$  К исследуется влияние скорости  $v^{(-)}$  до скачка на распределение молекул по колебательным уровням. Из графика видно, что чем выше скорость потока  $v^{(-)}$ , тем больше заселены верхние колебательные уровни молекул за ударной волной.

В заключение заметим, что распределения (6) позволяют по-новому с помощью меньшего числа макропараметров описать неравновесные режимы течений за ударными волнами, исследовать явления переноса и процессы термической диссоциации в неравновесном газе из ангармонических осцилляторов при произвольном уровне колебательного возбуждения.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Ступоченко Е. В., Лосев С. А., Осипов А. И. Релаксационные процессы в ударных волнах. М.: Наука, 1965.
2. Рыдалевская М. А. Модели описания ударных волн в химически реагирующих смесях газов // Моделирование в механике. 1988. Т. 2 (19), № 5. С. 111-118.
3. Жигулев В. А. Об уравнениях физической аэродинамики // Инж. журн. 1963. Т. 3, № 1. С. 137-139.

4. **Нагнибеда Е. А.** О приближенном решении системы уравнений Больцмана для смеси реагирующих газов // Вестн. Ленингр. ун-та. 1972. № 19. С. 113–119.
5. **Валландер С. В., Нагнибеда Е. А., Рыдалевская М. А.** Некоторые вопросы кинетической теории химически реагирующей смеси газов. Л.: Изд-во Ленингр. ун-та, 1977.
6. **Treanor C. E., Rich T. W., Rehm R. G.** Vibrational relaxation of anharmonic oscillators with exchange-dominant collisions // J. Chem. Phys. 1968. V. 48, N 4. P. 1798–1806.
7. **Никитин Е. Е., Осипов А. И.** Колебательная релаксация в газах // Итоги науки и техники. Кинетика и катализ. М.: Химия, 1977. Т. 4.
8. **Гордиец Б. Ф., Осипов А. И., Шелепин Л. А.** Кинетические процессы в газах и молекулярные лазеры. М.: Наука, 1980.

*Поступила в редакцию 10/XII 1993 г.*

---