

УДК 536.6.011.8

**ОБ ОДНОМ АНАЛИТИЧЕСКОМ МЕТОДЕ ОПИСАНИЯ
КИНЕТИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В ГАЗОДИНАМИКЕ**

ДУБРОВСКИЙ Г. В.

Решение полной системы уравнений газодинамики совместно с уравнениями кинетики, описывающими вращательно-колебательную релаксацию в газовых струях [1–3], кинетические процессы в ударных волнах [4–6], кинетику фазовых превращений [7], слишком сложно, что заставляет искать сокращенные способы описания релаксации, используя приближенные решения релаксационных уравнений [8]. Существующие решения связаны с частным видом столкновительных моделей в газовой фазе, что затрудняет как выявление общих закономерностей релаксационных явлений, так и перенос их на более сложные среды.

В данной работе, продолжающей исследования [9, 10], развит метод решения релаксационных уравнений для плавных распределений, который применим для произвольных столкновительных моделей при наличии переменных макропараметров и источников. Изучаются вопросы о влиянии на характер релаксации начальных данных, градиента температуры, внешних источников. Для смеси гармонических молекул получена нелинейная система уравнений для запаса квантов в сильно неравновесных условиях. Обсуждается постановка некоторых задач с учетом релаксационных эффектов.

1. Система релаксационных уравнений. Уравнения кинетики для смеси молекул сортов s с одним квантовым числом v запишем в виде

$$d_t c_s(v) + n^{-1} \nabla [n v_s(v)] = \sum_{\gamma} [I_s^-(v, \gamma) - I_s^+(v, \gamma)] + F_s(s) \quad (1.1)$$

$$c_s(v) = c_s(v; \mathbf{r}, t) = n_s(v; \mathbf{r}, t) | n(\mathbf{r}, t), \quad n = \sum_{s, v} n_s(v), \quad d_t = \partial_t + \mathbf{u} \nabla \quad (1.2)$$

$$I_s^-(v, \gamma) = K_{v-\gamma, v}^*(s) c_s(v-\gamma) - K_{v, v-\gamma}^*(s) c_s(v),$$

$$I_s^+(v, \gamma) = K_{v, v+\gamma}^*(s) c_s(v) - K_{v+\gamma, v}^*(s) c_s(v+\gamma) \quad (1.3)$$

$$K_{v, v+\gamma}^*(s) = \sum_{s_1} \left[K_{v, v+\gamma}(s, s_1) + n \sum_{v_1} K_{v, v+\gamma}^{v_1, v_1, v_1}(s, s_1) c_{s_1}(v_1 + \gamma_1) \right] \quad (1.4)$$

где $v_s(v)$ — скорость диффузии компоненты (s, v) ; $F_s(v)$ — слагаемое, описывающее локализованные источники частиц сорта (s, v) ; \mathbf{u} — гидродинамическая скорость; $K_{v, v+\gamma}(s, s_1)$, $K_{v, v+\gamma}^{v_1, v_1, v_1}(s, s_1)$ — константы скоростей $TV-$, $VV-$, VV' -переходов при столкновении частиц s и s_1 ; $I_s^\pm(v, \gamma)$ — изоквантовые γ -токи частиц на уровне v .

Широкий класс источников может быть описан выражением вида

$$F_s(v) = \Phi(\mathbf{r}, t) [L_s^+(v) - L_s^-(v) c_s(v)] \quad (1.5)$$

где Φ — пространственно-временной профиль источника, L_s^\pm — функции, характеризующие скорость прихода-убыли компоненты (s, v) . Кроме локализованных источников (1.5) на систему могут действовать нелокализованные источники, приводящие к небольцмановскому термостату.

Для большинства термостата выполняется принцип детального ба-

ланса

$$g_s(v) \exp\left(-\frac{E_s(v)}{kT}\right) K_{vv'}^*(s) = g_s(v') \exp\left(-\frac{E_s(v')}{kT}\right) \quad (1.6)$$

где $E_s(v)$ — энергия молекулы s в состоянии v , $g_s(v)$ — статистический вес состояния, k — постоянная Больцмана, T — температура газа. Для не-больцмановского термостата, возникающего из-за влияния поля излучения, неравновесных распределений в выражениях (1.4) для $K_{vv'}^*(s)$ и т. д., соотношение (1.6) не выполняется. При $F_s=0$ для больцмановского термостата, в котором выполняются соотношения (1.6), и для констант скоростей $K_{vv'}^*(s, s_1)$, $K_{vv'}^{v, v_1}(s, s_1)$ единственным стационарным распределением является больцмановское

$$c_s(v) = N_s Q_s^{-1} g_s(v) \exp\left(-\frac{E_s(v)}{kT}\right), \quad N_s = \frac{n_s}{n}$$

Для такого распределения при любых v и γ

$$I_s^-(v, \gamma) = I_s^+(v, \gamma) = 0$$

Как правило, процесс полной релаксации происходит через последовательность квазистационарных распределений $c_s(v)$, для которых выполняются приближенные равенства

$$I_s^-(v, \gamma) \approx I_s^+(v, \gamma) \approx I_s = \text{const} \quad (1.7)$$

где в частном случае может быть $I_s=0$. Выполнимость (1.7) может быть обеспечена, например, за счет обращения в ноль одноквантовых токов от VV -процессов (распределение Тренора), равенства всех одноквантовых токов постоянному значению $I_s \neq 0$ (кинетика нуклеации) и т. д.

Неравновесный запас внутренней энергии в единице объема вычисляется по формуле

$$e_r = \mu^{-1} \sum_{s, v} c_s(v) E_s(v), \quad \mu = n^{-1} \sum_s n_s(r, t) m_s$$

где m_s — масса молекулы s . Все кинетические коэффициенты вязкого и теплопроводного газа в режиме замедленной релаксации могут быть выражены через $c_s(v)$ [11], так что замыкание системы уравнений релаксационной газодинамики на уровне сокращенного числа макропараметров требует построения решений системы (1.1).

2. Аналитический метод для плавных распределений. Будем рассматривать систему (1.1) с источником вида (1.5). Учитывая, что положительные источники $F_s^+(v)$ хуже описываются в рамках развивающегося ниже метода, рассмотрим вопрос об их точном учете в линеаризованной постановке. Для простоты будем пренебречь в (1.1) диффузией ($v_s(v)=0$). Запишем линеаризованную систему (1.1) с положительным источником в матричной форме

$$d_t c_s(t) = K_s(t) c_s(t) + F_s(t), \quad 0 \leq t < \infty$$

$$\{K_s\}_{vv'} = K_{vv'}^*(s), \quad c_s(0) = c_{s0}$$

и будем искать ее решение в виде

$$c_s(t) = \Lambda_s(t) c_s^*(t) + q_s(t) \quad (2.1)$$

$$d_t c_s^*(t) = K_s(t) c_s^*(t), \quad 0 \leq t < \infty, \quad c_s^*(0) = c_{s0}, \quad \sum_v c_s(v) = \text{const} \quad (2.2)$$

$$\Lambda_s(t) = \int_0^t \lambda_s(t') dt', \quad \lambda_s(t) = \sum_v F_s^+(v)$$

Для определения q_s имеем следующую задачу:

$$d_t q_s = K_s q_s + F_s^+ - \lambda_s c_s^*, \quad q_s(0) = c_{s0}, \quad 0 \leq t < \infty$$

Поскольку начальные данные c_{s0}^* ограничены только условием нормировки, положив

$$F_s^+(t) = \lambda_s(t) c_s^*(t)$$

приходим к задаче без источников с исходными начальными данными. Таким образом, в линейной постановке действие источников может быть точно учтено за счет выбора начальных данных c_{s0}^* .

Рассмотрим теперь исходную систему (1.1), предполагая $v_s, K_{vv'}^*(s)$ заданными функционалами $c_s(v)$. Следуя методу [9, 10], произведем в уравнениях (1.1) нелинейную замену

$$f(v) \equiv f_s(v; r, t) = c_s(v+1)/c_s(v) a_s(v), \quad a_s(v) = K_{v,v+1}^*(s)/K_{v+1,v}^*(s)$$

из которой следует

$$c_s(v+\gamma) = c_s(v) \prod_{m=0}^{v-1} a_s(v+m) f_s(v+m) \quad (2.3)$$

Для больцмановского термостата имеем

$$c_s(v) = N_s Q_s^{-1} \exp\left(-\frac{E_s(v)}{kT}\right) \prod_{m=0}^v f_s(m)$$

Используя (2.3), (1.1), после ряда выкладок получаем

$$d_t f_s(v) = D_s[f_s(v)] + E_s[f_s(v')] - [(d_t + v_s(v+1)) \ln a_s(v) + v_s(v+1) \nabla + \Gamma_s(v)] f_s(v) + Z_s(v) \quad (2.4)$$

$$D_s = \sum_{\gamma} [A_s(v, \gamma) f_s^{r+1}(v) + B_s(v, \gamma) f_s(v) + X_s(v, \gamma) f_s^{r-1}(v)] \quad (2.5)$$

$$A_s(v, \gamma) = K_{v+1+r, v+1}(s) \pi_s(v+1, \gamma) - K_{v+r, v}(s) \pi_s(v, \gamma)$$

$$B_s(v, \gamma) = K_{v, v+r}^*(s) + K_{v, v-r}^*(s) - K_{v+1, v+1-r}^*(s) - K_{v+1, v+1+r}^*(s)$$

$$X_s(v, \gamma) = K_{v+1-r, v+1}^*(s) \pi_s^{-1}(v-\gamma+1, \gamma) - K_{v-r, v}^*(s) \pi_s^{-1}(v-\gamma, \gamma)$$

$$\pi_s(v, \gamma) = \prod_{m=0}^{r-1} a_s(v+m)$$

Здесь D_s — часть интеграла столкновений, диагональная по v . Недиагональное по v слагаемое имеет вид

$$\begin{aligned} E_s &= f_s^{r+1}(v) [K_{v+1+r, v+1}^*(s) \pi_s(v+1, \gamma) (\zeta_s(v+1, \gamma) - 1) - \\ &- K_{v+r, v}^*(s) \pi_s(v, \gamma) (\zeta_s(v, \gamma) - 1)] + f_s^{r-1}(v) [K_{v+1, v+1}^*(s) \pi_s^{-1}(v-\gamma+1, \gamma) \times \\ &\times (\zeta_s^{-1}(v-\gamma+1, \gamma) - 1) - K_{v-1, v}^*(s) \pi_s^{-1}(v-\gamma, \gamma) (\zeta_s^{-1}(v-\gamma, \gamma) - 1)] \end{aligned}$$

$$\xi_s(v, \gamma) = \prod_{m=0}^{r-1} \frac{f_s(v+m)}{f_s(v)}$$

Выражения для Γ_s^- , Z_s в (2.4) имеют вид

$$\begin{aligned}\Gamma_s^-(v) &= [L_s^-(v+1) - L_s^-(v)]\Phi(r, t) \\ Z_s(v) &= \frac{L_s^+(v)}{c_s(v)a_s(v)} \left[\frac{c_s(v+1)}{c_s(v)} - \frac{L_s^+(v+1)}{L_s^+(v)} \right] \Phi + \\ &+ \frac{f_s(v)}{c_s(v)n} \nabla [nc_s(v)(v_s(v) - v_s(v+1))]\end{aligned}$$

Если переходные вероятности быстро убывают с изменением γ , то основной вклад дают одноквантовые переходы ($\gamma=1$), для которых

$$\pi_s(v, \gamma) \approx \pi_s(v, 1) = a_s(v), \quad A_s(v, 1) \equiv A_s(v), \dots \quad (2.6)$$

В этом приближении в сумме (2.5) остается одно слагаемое, причем

$$A_s(v) + B_s(v) + X_s(v) = 0 \quad (2.7)$$

Для больцмановского термостата, как нетрудно убедиться, справедливы соотношения

$$\pi_s(v, \gamma) = \frac{g_s(v+\gamma)}{g_s(v)} \exp \left[-\frac{E_s(v+\gamma) - E_s(v)}{kT} \right] = \frac{K_{v, v+\gamma}^*(s)}{K_{v+\gamma, v}^*(s)} \quad (2.8)$$

$$A_s(v, \gamma) + B_s(v, \gamma) + X_s(v, \gamma) = 0 \quad (2.9)$$

Пренебрегая диффузией ($v_s=0$) и моделируя положительный источник некоторой заданной функцией $R_s^+(v)$, ограничимся приближением (2.6) для небольцмановского термостата либо будем считать термостат больцмановским при $\gamma \geq 1$. Это приводит к равенствам (2.7) или (2.9), которые дают следующие условия для D_s и E_s :

$$D_s[f_s(v)=1] = 0, \quad E_s[f_s(v')=1] = 0$$

В случае плавных распределений, когда

$$|\xi_s(v, \gamma) - 1| \ll 1$$

недиагональная часть интеграла столкновений мала ($E_s \rightarrow \epsilon E_s$, $\epsilon \ll 1$), система (2.4) записывается в виде

$$\begin{aligned}d_t f_s(v) &= D_s[f_s(v)] + R_s^+(v) - R_s^-(v)f_s(v) + \epsilon E_s[f_s(v')] \\ R_s^-(v) &\equiv d_t \ln a_s(v) + \Gamma_s^-(v), \quad f_s(v, 0) = f_{s0}(v)\end{aligned} \quad (2.10)$$

Основное достоинство системы (2.10) заключается в том, что в нулевом порядке по ϵ (плавные распределения) она диагональна. Это позволяет сделать ряд общих заключений о характере релаксационных процессов в неоднородных потоках газа.

3. Анализ физических следствий. При условиях $R_s^\pm(v) \rightarrow 0$, $f_{s0}(v) = 1$ имеем

$$d_t f_s(v) = 0, \quad f_s(v, t) = 1 \quad (3.1)$$

Это означает сохранение произвольного квазистационарного распределения во времени (свойство аднабатичности по отношению к переменной v) и позволяет считать $f_s(v)$ аднабатической переменной системы (1.1). Вследствие этого в струйных течениях и ударных волнах отход от равновесия определяется вначале градиентами и источниками, а только затем столкновениями.

Для малых отклонений от больцмановского распределения система (3.1) линеаризуется ($f_s(v)=1+\varphi_s(v)$) и с хорошей точностью допускает аналитическое решение

$$\varphi_s(v) = \exp \left[- \int_0^t P_s(v, t') dt' \right] \int_0^t \Pi_s(v, t') \exp \left[- \int_0^{t'} P_s(v, t'') dt'' \right] dt' \quad (3.2)$$

$$P_s(v) = \tau_s^{-1}(v) + R_s^-(v), \quad \Pi_s(v) = R_s^+(v) - R_s^-(v)$$

$$\tau_s^{-1}(v) = \sum_{\gamma} \gamma \tau_s^{-1}(v, \gamma), \quad \tau_s^{-1}(v, \gamma) = X_s(v, \gamma) - A_s(v, \gamma)$$

Как видно из (3.2), столкновительные процессы, градиенты температуры и источники влияют на релаксацию аддитивным образом. Учет много-квантовых переходов уменьшает время релаксации $\tau_s(v)$ уровня v . Под временем релаксации уровня v за счет γ -квантовых переходов следует понимать величину $\tau_s(v, \gamma)$.

Приведем решение нелинейной релаксационной задачи (2.10) с переменными коэффициентами при $\epsilon \rightarrow 0$, $R_s^\pm(v) = 0$, $\gamma = 1$ [10]

$$f_s(v) = M_s^-(v) / M_s^+(v) \quad (3.3)$$

$$M_s^\mp(v) = 1 + f_{s0}(v) + [1 - f_{s0}(v)] \left[\int_0^t dt' \sigma_s(v, t') \exp \left(- \int_0^{t'} \frac{dt''}{\tau_s(v, t'')} \right) \mp \right. \\ \left. \mp \exp \left(- \int_0^t \frac{dt'}{\tau_s(v, t')} \right) \right]$$

$$\tau_s^{-1}(v) = X_s(v) - A_s(v), \quad \sigma_s(v) = X_s(v) + A_s(v)$$

Как видно из (3.3), решение описывает регулярную релаксацию $f_{s0}(v) \rightarrow 1$, $t \rightarrow \infty$, если $\tau_s^{-1}(v) > 0$. В противном случае $f_s(v, \infty) \neq 1$, так что равенство $\tau_s^{-1}(v) = 0$ следует понимать как критерий неустойчивости решения.

В качестве примера релаксации с локализованными источниками рассмотрим систему (2.10) с $\epsilon \rightarrow 0$, $\gamma = 1$ и не зависящими от времени коэффициентами. В этом случае она преобразуется к виду

$$d_s f_s(v) = A_s(v) [f_s(v) - z_{s1}(v)] [f_s(v) - z_{s2}(v)] \quad (3.4)$$

где $z_{s1,2}(v)$ — постоянные корни квадратного уравнения

$$z_s^2(v) - 2d_s(v)z_s(v) + \mu_s(v) = 0$$

$$d_s(v) = [A_s(v) + X_s(v) + R_s^-(v)] [2A_s(v)]^{-1},$$

$$\mu_s(v) = [X_s(v) + R_s^+(v)] [A_s(v)]^{-1}$$

Решение уравнения (3.4) приводит к результатам, зависящим от поведения $z_{s1,2}(v)$. Если корни действительны ($z_{s2}(v) > z_{s1}(v)$), то получаем решение, описывающее регулярную релаксацию $f_{s0}(v) \rightarrow 1$ и совпадающее с решением (3.3) в случае постоянных коэффициентов и $R_s^\pm(v) = 0$. При этом

$$\tau_s^{-1}(v) = |X_s(v) - A_s(v)|, \quad f_s(v, t) \xrightarrow[t \rightarrow \infty]{} \begin{cases} 1, & \tau_s^{-1}(v) > 0 \\ \frac{X_s(v)}{A_s(v)}, & \tau_s^{-1}(v) < 0 \end{cases}$$

При совпадающих корнях имеем неэкспоненциальный, а при комплекс-

ных — осциллирующий характер релаксации. Поведение корней зависит от знака детерминанта

$$\kappa_s(v) = [X_s(v) - A_s(v)]^2 + 2[A_s(v) + X_s(v)]R_s^-(v) + R_s^{-2}(v) - 4A_s(v)R_s^+ \quad (3.5)$$

Из (3.5) очевидно, что влияние источников становится особенно существенным в области неустойчивости $\tau_s^{-1}(v)=0$. Отметим, что равенство $\tau_s^{-1}(v)=0$ может быть выполнено для небольцмановского термостата.

4. Модель гармонических осцилляторов. Для гармонических осцилляторов справедливы соотношения

$$\begin{aligned} K_{v+1,v}^*(s, \alpha_s) &= (v+1)G_s^1(\alpha_s), \quad K_{v,v+1}^*(s, \alpha_s) = (v+1)G_s^0(\alpha_s) \\ \alpha_s &= \sum_v v c_s(v), \quad G_s^1 = \sum_{s_1} [K_{10}(s, s_1) + n K_{10}^{01}(s, s_1) (N_{s_1} + \alpha_{s_1})] \\ G_s^0 &= \sum_{s_1} [K_{01}(s, s_1) + n K_{01}^{10}(s, s_1) \alpha_{s_1}] \end{aligned} \quad (4.1)$$

где $K_{01}(s, s_1)$, $K_{01}^{10}(s, s_1)$ — константы скоростей основных VT -, VV' -переходов. Используя уравнения (1.1), а также соотношения (4.1) ($v_s(v)=0$), получим систему уравнений для α_s .

$$\begin{aligned} d_t \alpha_s &= J_s(\alpha_s) + Y_s(\alpha_s), \quad Y_s = \sum_v v F_s(v), \quad 0 \leq t < \infty \\ J_s &= \sum_s \{ N_s K_{01}(s, s_1) - [K_{10}(s, s_1) - K_{01}(s, s_1)] \alpha_s - \\ &- n [K_{10}^{01}(s, s_1) \alpha_s (N_{s_1} + \alpha_{s_1}) - K_{01}^{10}(s, s_1) \alpha_{s_1} (N_s + \alpha_s)] \} \\ e_r &= k \mu^{-1} \sum_s \theta_s \alpha_s, \quad \theta_s = \frac{\hbar \omega_s}{k} \end{aligned} \quad (4.2)$$

На основании (4.1) можно найти, что

$$A_s = G_s^0, \quad X_s = G_s^1, \quad a_s = K_{01}^*(s)/K_{10}^*(s) \quad (4.3)$$

$$\begin{aligned} d_t f_s(v) &= G_s^0(t) f_s^2(v) - [G_s^0(t) + G_s^1(t)] f_s(v) + \\ &+ G_s^1(t) + R_s^+(v) - R_s^-(v) f_s(v) + \varepsilon E_s[f_s(v')], \quad f_s(v, 0) = f_{s0}(v) \end{aligned} \quad (4.4)$$

Из (4.4) видно, что в случае источников и начальных данных, не зависящих от v (последнее выполняется, например, для начальных больцмановских распределений с набором колебательных температур $T_s(v)(0) \neq T$), с учетом $f_s(v, t) = f_s(t)$, $E_s = 0$ получаем

$$\begin{aligned} c_s(v, t) &= c_s(t) [N_s^{-1} \alpha_s(t)]^v [1 + N_s^{-1} \alpha_s(t)]^{v+1} = \\ &= c_s(t) \left[1 - \exp\left(\frac{\theta_s}{T_s'(t)}\right) \right] \exp\left(-\frac{v \theta_s}{T_s(v, t)}\right) \end{aligned} \quad (4.5)$$

т. е. мы имеем известное свойство канонической инвариантности, обобщенное на случай неоднородных потоков газа и источников. Из (4.2) получаем замкнутую систему уравнений для $\alpha_s(t)$ в потоке газа при наличии источников указанного типа

$$d_t \alpha_s(t) = \Psi_s(\alpha_s(t)) \quad (4.6)$$

Эта система представляет интерес при изучении релаксационных неустойчивостей ударных волн.

Аналитические решения для $c_s(v)$ через e_r и кинетические коэффициенты позволяют замкнуть систему уравнений релаксационной газодинамики через минимальное число макропараметров. Установленное свойство адабатичности в струйных течениях и ударных волнах позволяют правильно поставить задачу о начальной стадии отклонения от равновесия и дает количественные критерии для получения сильных неравновесностей. С помощью источников (накачка, излучение, кластеризация потока, химические реакции) можно в принципе получать немонотонные режимы релаксации (включая автоволновые). Из результатов работы можно получать критерии таких режимов. В условиях сильной неравновесности построенные решения (в частности, (4.5), (4.6)) могут быть использованы для аналитических исследований нелинейных явлений переноса, а также релаксационных неустойчивостей ударных волн.

ЛИТЕРАТУРА

1. Дуллов В. Г., Лукъянов Г. А. Газодинамика процессов истечения. Новосибирск: Наука, 1984. 234 с.
2. Конюхов В. К. Газодинамический CO₂-лазер непрерывного действия // Тр. ФИАН. 1979. Вып. 113. С. 50–114.
3. Шарафутдинов Г. Г. Вращательная релаксация в свободных струях. Докт. дис. Новосибирск: ИТМ СО АН СССР, 1984.
4. Зельдович Я. Б., Баренблatt Г. И., Либрович В. Б., Махвиладзе Г. М. Математическая теория горения и взрыва. М.: Наука, 1980. 478 с.
5. Ступченко Е. В., Лосев С. А., Осипов А. И. Релаксационные процессы в ударных волнах. М.: Наука, 1965. 484 с.
6. Буянова Е. А., Ловецкий Е. Е., Силаков В. П., Фетисов В. С. Стационарные ударные волны в неравновесном двухатомном газе // Хим. физика. 1982. № 12. С. 1701–1703.
7. Kōtake S., Glass I. I. Flows with nucleation and condensation // Progr. Aerospace Sci. 1981. V. 19. № 2/4. P. 129–196.
8. Гордиец Б. Ф., Осипов А. И., Шелепин Л. А. Кинетические процессы в газах и молекулярные лазеры. М.: Наука, 1980. 512 с.
9. Васильев А. П., Дубровский Г. В., Стрельчена В. М. Приближенное аналитическое описание колебательной релаксации слабоангмонических осцилляторов // ПМТФ. 1984. № 5. С. 16–24.
10. Дубровский Г. В., Стрельчена В. М. Релаксация ангмонических молекул // ПМТФ. 1986. № 3. С. 22–31.
11. Богданов А. В., Горбачев Ю. Е., Дубровский Г. В. и др. Теоретические модели релаксационной газодинамики и методы расчета неравновесных течений структурного газа. VI. Аналитические выражения для коэффициентов переноса и их расчет: Препринт № 930. Л.: ФТИ АН СССР, 1985. 62 с.

Ленинград

Поступила в редакцию
14.II.1986