

01: 03

© 1990 г.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭВОЛЮЦИИ КОЛЕБАТЕЛЬНОЙ ФУНКЦИИ
РАСПРЕДЕЛЕНИЯ МОЛЕКУЛ И СТРУКТУРЫ ТЕЧЕНИЯ
В РЕЛАКСАЦИОННОЙ ЗОНЕ ЗА ФРОНТОМ
СТАЦИОНАРНОЙ УДАРНОЙ ВОЛНЫ
В КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВОЗБУЖДЕННОМ МОЛЕКУЛЯРНОМ ГАЗЕ

К. Г. Гуреев, В. О. Золотарев

Впервые в самосогласованной постановке решена задача об эволюции функции распределения молекул по колебательным уровням и структуре течения за фронтом стационарной ударной волны (УВ) в колебательно-возбужденном газе. Получены пространственные зависимости функции распределения молекул по колебательным уровням и газодинамические параметры на протяжении всей релаксационной зоны за фронтом УВ.

Введение

Исследование процессов формирования и распространения ударных волн (УВ) в колебательно-возбужденном молекулярном газе представляет интерес в связи с проблемой создания плазмохимических реакторов на основе газового разряда [1, 2], а также с использованием релятивистских электронных пучков [3]. С одной стороны, возникновение УВ при сверхзвуковой прокачке рабочего газа может приводить к релаксации энергии колебаний молекул за фронтом УВ, а следовательно, снижать эффективность реактора [4]. С другой стороны, специально создавая УВ нужной интенсивности, можно достичь оптимальных условий протекания плазмохимических реакций на ее фронте и тем самым добиться повышения эффективности плазмохимического реактора.

Формирование и распространение УВ в колебательно-возбужденном молекулярном газе уже исследовалось рядом авторов. Так, в работе [5] показано, что в колебательно-возбужденном газе УВ могут приобретать характер детонационных волн. Некоторые свойства таких волн в стационарной постановке задачи изучены в работах [6, 7, 8] на основе рассмотрения ударных адиабат. В частности, показано, что стационарные УВ с заданным числом Маха возможны лишь при ограниченной сверху степени колебательной неравновесности газа. При максимальной степени неравновесности, когда в газе возможна стационарная УВ с заданным числом Маха, она распространяется в режиме Чепмена—Жуге [9].

Исследованию распространения нестационарных УВ в колебательно-возбужденном газе посвящены работы [10, 11]. Основное внимание в этих работах уделяется динамике распространения УВ, в то время как структура УВ специально не рассматривается.

Структура релаксационной зоны стационарной УВ в колебательно-возбужденном газе изучалась в работах [12, 13]. Для описания колебательной релаксации в [12, 13], так же как и в [11], использована модель гармонических осцилляторов (модель Ландау—Теллера), которая дает завышенное значение времени релаксации энергии колебаний молекул при высокой неравновесности газа [14].

Наряду с исследованием структуры УВ в колебательно-возбужденном газе большой интерес представляет исследование эволюции функции распределения молекул по колебательным уровням в релаксационной зоне за фронтом УВ, распространяющейся в колебательно-возбужденном газе. Знание функции распределения необходимо для определения скорости релаксации энергии колебаний молекул, констант скоростей диссоциации и других элементарных процессов с участием колебательно-возбужденных молекул [15]. Исследованию эволюции функции распределения молекул по колебательным уровням за фронтом УВ в колебательно-возбужденном газе посвящена работа [16]. В ней показано, что УВ в колебательно-возбужденном газе приводит к довозбуждению высоких колебательных уровней молекул и возникновению в узкой зоне за фронтом УВ абсолютной инверсии заселенностей промежуточных колебательных уровней. Отметим, что в [16] исследование эволюции функции распределения за фронтом УВ выполнено в несамосогласованной постановке без учета энерговыделения и движения газа в процессе эволюции функции распределения; учет УВ осуществлен лишь путем введения скачкообразного изменения температуры и давления газа на ударном фронте.

Попытка исследования процессов в релаксационной зоне за фронтом УВ в колебательно-возбужденном газе на основе совместного решения уравнений гидродинамики и колебательной кинетики выполнена в работе [17]. С учетом реально существующей ангармоничности колебаний молекул получены пространственные распределения газодинамических параметров в релаксационной зоне. Однако использованная в [17] постановка задачи не является самосогласованной. В качестве начальной функции распределения молекул по колебательным уровням использована функция распределения Больцмана с колебательной температурой, превышающей температуру газа. В то же время известно (см., например, [15]), что в неравновесных условиях функция распределения молекул по колебательным уровням существенно отличается от больцмановской.

В настоящей работе впервые в самосогласованной постановке решена задача об эволюции функции распределения молекул по колебательным уровням и о структуре газодинамического течения за фронтом стационарной УВ в колебательно-возбужденном газе. Решение выполнено путем численного интегрирования системы уравнений газодинамики совместно с системой кинетических уравнений, описывающих заселенности колебательных уровней молекул. Получены пространственные зависимости функции распределения молекул по колебательным уровням и газодинамических параметров в релаксационной зоне за фронтом УВ в колебательно-возбужденном молекулярном газе. Подтвержден результат работы [16], что УВ в колебательно-возбужденном газе может приводить к возникновению абсолютной инверсии заселенностей колебательных уровней. В системе координат фронта УВ обнаружено немонокотное пространственное распределение колебательной температуры первого уровня в релаксационной зоне УВ в колебательно-возбужденном газе. Температура первого уровня за фронтом УВ вначале растет, достигая максимума, а затем уменьшается, релаксируя к значению, равному температуре газа. Кроме того, показано, что при сильной неравновесности газа энерговыделение за фронтом стационарной УВ в колебательно-возбужденном газе может сопровождаться понижением температуры газа.

В работе также предложена упрощенная модель для расчета газодинамических течений колебательно-возбужденного молекулярного газа и определены условия, при которых применение упрощенной модели оправдано.

Постановка задачи, основные уравнения и метод решения

Пусть степень неравновесности газа и интенсивность стационарной УВ таковы, что влиянием диссоциации и возбуждением электронных уровней молекул можно пренебречь.

Систему координат свяжем с фронтом УВ, направив ось x по потоку газа и положив $x=0$ на фронте УВ. Значения параметров газа непосредственно за фронтом УВ определяем, исходя из параметров газа перед фронтом по известным соотношениям Гюгонио [9]

$$\frac{\rho_1}{\rho_0} = \frac{v_0}{v_1} = \frac{M_0^2(\gamma+1)}{2+M_0^2(\gamma-1)}, \quad (1)$$

$$\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_0} = \frac{p_1}{p_0} = \frac{2\gamma}{\gamma+1} M_0^2 - \frac{\gamma-1}{\gamma+1}, \quad (2)$$

$$\frac{T_1}{T_0} = \frac{(2\gamma M_0^2 - \gamma + 1)((\gamma - 1) M_0^2 + 2)}{M_0^2(\gamma + 1)^2}, \quad (3)$$

где ρ , p , T , v , ε — плотность, давление, температура, скорость газа, плотность энергии поступательных и вращательных степеней свободы молекул соответственно; $M_0 = v/c_{s0}$ — число Маха УВ, c_{s0} — скорость звука; γ — показатель адиабаты. Индексом нуль отмечены параметры газа перед фронтом УВ.

Эволюция функции распределения молекулы по колебательным уровням и движение газа в релаксационной зоне за фронтом УВ в пренебрежении вязкостью, теплопроводностью и излучением описываются системой уравнений

$$\frac{d}{dx} v N_n = F_n, \quad (4)$$

$$\rho v \frac{dv}{dx} = - \frac{dp}{dx}, \quad (5)$$

$$(\varepsilon + p) \frac{dv}{dx} + v \frac{d\varepsilon}{dx} = - \sum_n E_n F_n, \quad (6)$$

где N_n — заселенность n -го колебательного уровня (т. е. концентрация молекул, находящихся в колебательном состоянии n), E_n — его энергия.

Выражение для правой части уравнения (4) имеет вид (см. [14])

$$F_n = N \left(\sum_m P_{mn} N_m - \sum_m P_{nm} N_n \right) + \sum_{m,s,l} Q_{msl}^{sl} N_s N_m - \sum_{m,s,l} Q_{lm}^{ls} N_l N_n, \quad (7)$$

где P_{mn} — константа скорости VT -процесса, при котором молекулы из состояния m переходят в состояние n ; Q_{msl}^{sl} — константа скорости VV -обмена, при котором молекулы из состояний s и m переходят в состояние l и n соответственно; $N = \sum_n N_n = \rho/\mu$ — концентрация молекул, μ — масса молекулы. Отметим, что

$$\sum_n F_n = 0.$$

Константы скоростей прямых и обратных процессов связаны между собой соотношениями детального равновесия [14].

Будем учитывать только одноквантовые переходы молекул. Для описания колебательного обмена используем модель ангармонических осцилляторов Морзе, для которых энергия n -го состояния

$$E_n = \hbar\omega (n - \delta n (n + 1)), \quad (8)$$

где $\hbar\omega$ — величина колебательного кванта, δ — ангармоничность молекулы.

Выражения для констант VT - и VV -процессов, полученные с помощью SSH -теории в форме, предложенной в работе [18], имеют следующий вид:

$$P_{n+1n} = P_{10} \frac{n+1}{1-\delta(n+1)} \exp\{\delta_{VT} n\}, \quad (9)$$

$$Q_{n+1n}^{mm+1} = Q_{10} \frac{(m+1)(n+1)}{(1-\delta(m+1))(1-\delta(n+1))} \times \\ \times \exp\{-\delta_{VT} |n-m|\} \exp\{0.5(E_{n+1} + E_m - E_n - E_{m+1})/(kT)\}, \quad (10)$$

где k — постоянная Больцмана. Величины P_{10} , Q_{10} , δ_{VT} , δ_{VV} зависят от параметров молекул и для заданного сорта молекул являются функциями только температуры.

Система уравнений (4)–(6) замыкается уравнением состояния газа

$$\varepsilon = p/(\gamma - 1). \quad (11)$$

Введем следующие обозначения: $\varepsilon_V = \sum_n E_n N_n$ — плотность энергии колебательных степеней свободы молекул, ε_V^* — ее равновесное значение, $\xi = (\varepsilon_V - \varepsilon_V^*) / (\varepsilon + \varepsilon_V^*)$ — степень неравновесности газа, $u = \varepsilon + \varepsilon_V$ — плотность полной внутренней энергии газа, $\delta_n = N_n / N$.

Система уравнений (4)–(6) имеет три интеграла движения

$$j = \rho v, \quad (12)$$

$$r = jv + p, \quad (13)$$

$$q = (u + r - 0.5jv)v. \quad (14)$$

Используя два первых интеграла движения, систему уравнений (4)–(6) преобразуем к виду

$$\frac{d\delta_n}{dx} = \frac{F_n}{j}, \quad (15)$$

$$\frac{dv}{dx} = \frac{-(\gamma - 1) \sum_n E_n F_n}{\gamma(r - jv) - jv}. \quad (16)$$

Будем решать численно задачу Коши для системы уравнений (15), (16).¹ Условия при $x=0$ рассчитываются по исходному состоянию с использованием

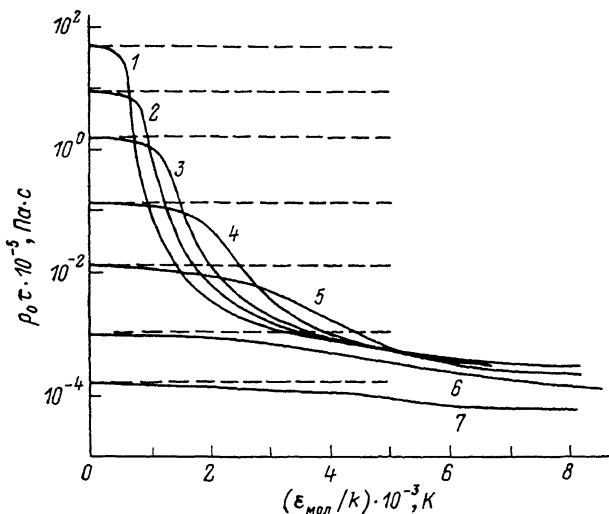


Рис. 1. Зависимости характерного времени релаксации энергии колебаний молекул азота от ε_{mol} для различных значений температуры газа.

1 — 300, 2 — 400, 3 — 500, 4 — 700, 5 — 1000, 6 — 1500, 7 — 2000 К. Сплошные кривые — с учетом ангармоничности, штриховые — согласно модели гармонических осцилляторов.

соотношений Гюгонио (1)–(3). Скачок заселенностей уровней на фронте УВ $N_{n1}/N_{n0} = \rho_1/\rho_0$, откуда $\delta_{n1} = \delta_{n0}$. В качестве исходной используется квазистационарная функция распределения молекул по колебательным уровням, найденная по методу работы [19]. Из-за жесткости системы уравнений (15), (16) для ее решения применяется метод Гира [20].

В расчетах учитывается 50 уровней колебательного возбуждения. Для молекул азота приняты следующие значения констант [18]: $\hbar\omega/k = 3400$ К, $\delta = 6.217 \cdot 10^{-3}$, $\delta_{VV} = \delta_{VV} = 6.8/\sqrt{T}$, где T — температура газа в К. Для констант скоростей VT- и VV-обменов между нижними колебательными уровнями P_{10} и Q_{10} используются значения из работы [21].

¹ Используя интегралы (14) и $\sum_n \delta_n = 1$, можно понизить порядок системы уравнений (15), (16). Однако в данной работе такой подход не применялся. Значения интегралов использовались для контроля консервативности при численном интегрировании системы (15), (16). Изменение указанных интегралов в расчетах не превышало 0.01 %.

Наряду с системой уравнений (4)–(6) для описания течения в релаксационной зоне будем использовать упрощенную модель, основанную на предположении о наличии квазистационарной функции распределения молекул по колебательным уровням [14, 22]. В этом случае течение в релаксационной зоне описывается системой уравнений

$$\frac{d}{dx}(\rho v) = 0, \quad (17)$$

$$\rho v \frac{dv}{dx} = -\frac{dp}{dx}, \quad (18)$$

$$u \frac{dv}{dx} + p \frac{dv}{dx} + v \frac{du}{dx} = 0, \quad (19)$$

$$(\epsilon + p) \frac{dv}{dx} + v \frac{d\epsilon}{dx} = \frac{u - \epsilon \cdot \epsilon_V^+}{\tau}. \quad (20)$$

Характерное время релаксации энергии колебаний молекул τ будем определять по методу работы [19]. На рис. 1 представлена зависимость τ от средней

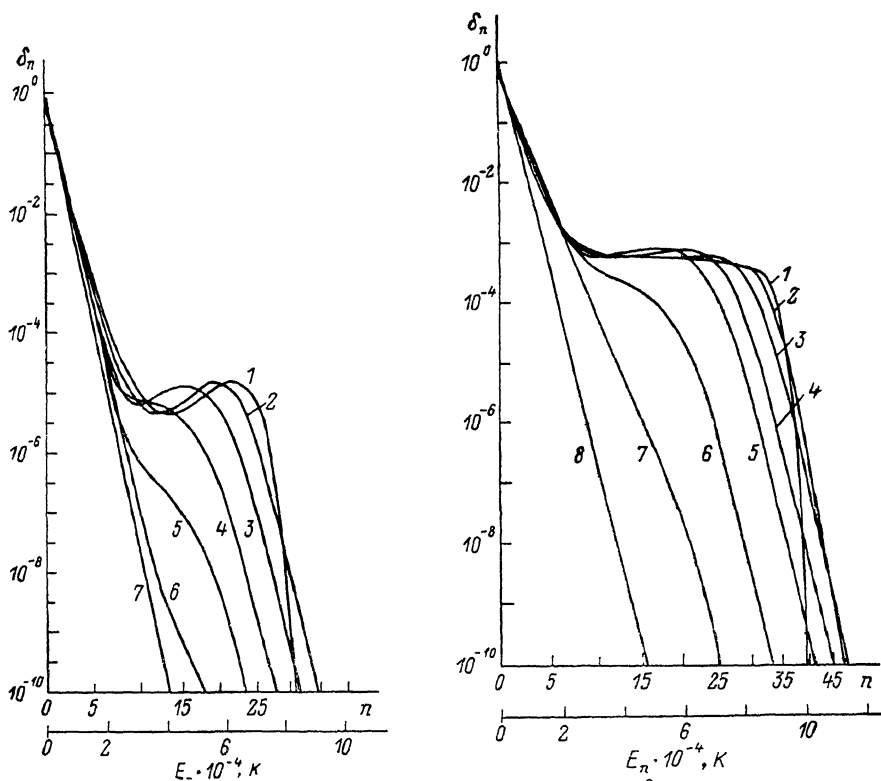


Рис. 2. Эволюция функции распределения молекул по колебательным уровням в релаксационной зоне за фронтом стационарной УВ, распространяющейся по колебательно-возбужденному азоту.

$M_0=5$, $T_0=300$ К, $\xi_0=0.999$; p_0x , Па·см: 1 — 0.00, 2 — $1.34 \cdot 10^2$, 3 — $4.72 \cdot 10^2$, 4 — $1.07 \cdot 10^3$, 5 — $2.00 \cdot 10^3$, 6 — $3.19 \cdot 10^3$, 7 — $2.523 \cdot 10^3$.

Рис. 3. То же, что и на рис. 2.

$M_0=5$, $T_0=300$ К, $\xi_0=2.988$; 1 — 0.00, 2 — 1.81, 3 — $5.51 \cdot 10^1$, 4 — $1.62 \cdot 10^2$, 5 — $3.65 \cdot 10^2$, 6 — $1.38 \cdot 10^3$, 7 — $3.81 \cdot 10^3$, 8 — $1.26 \cdot 10^4$.

энергии колебательного возбуждения молекул $\epsilon_{\text{мол}} = \epsilon_V/N$ для различных значений температуры газа. Для сравнения на том же рисунке представлены аналогичные зависимости для гармонических осцилляторов ($\delta=0$).

На рис. 2, 3 представлены результаты исследования эволюции функции распределения молекул по колебательным уровням в релаксационной зоне за фронтом УВ с числом Маха $M_0=5$ для двух различных значений начальной степени неравновесности газа ξ_0 .

Квазистационарная функция распределения молекул по колебательным уровням (см. кривые 1 на рис. 2, 3) в условиях колебательной неравновесности имеет три характерных участка [14, 18, 23]. На нижних уровнях функция распределения молекул близка к триноровской [23]. На верхних уровнях функция распределения близка к распределению Больцмана с характерной температурой, равной температуре газа. На промежуточных уровнях при достаточной степени неравновесности ($\xi_0 \geq 0.5$ при $T_0=300$ К) существует участок функции распределения типа «плато», сшивающий триноровскую и больцмановскую ветви

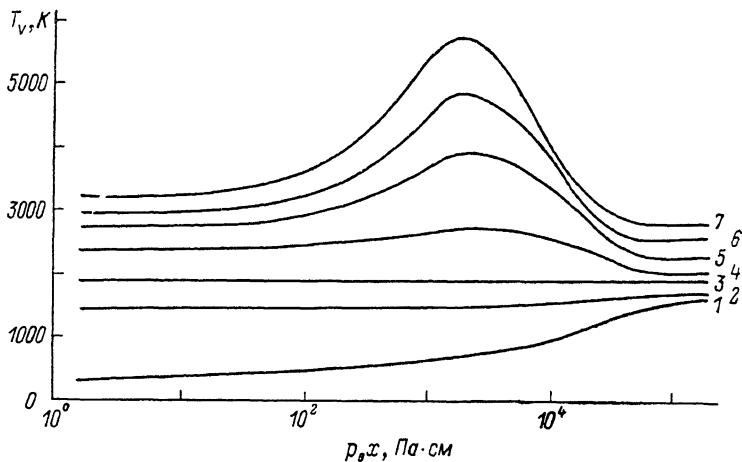


Рис. 4. Пространственные распределения колебательной температуры первого уровня в релаксационной зоне для различных значений ξ_0 .

1 — 0.00, 2 — 0.498, 3 — 0.999, 4 — 2.007, 5 — 4.010, 6 — 6.036, 7 — 8.512; $T_0=300$ К, $M_0=5$; $T_v = E_1/\ln(N_0/N_1)$.

функции распределения. При значениях степени неравновесности больше некоторого ($\xi_0 \geq 1.0$ при $T_0=300$ К) на плато существует абсолютная инверсия заселенностей колебательных уровней (см. кривую 1 на рис. 2). Это так называемый случай «промежуточной неравновесности» [22]. При еще более высоких значениях степени неравновесности ($\xi_0 \geq 2.5$ при $T_0=300$ К) абсолютная инверсия заселенностей колебательных уровней отсутствует (кривая 1 на рис. 3). Эта ситуация соответствует случаю «сильной неравновесности» [22].

УВ приводит к эволюции функции распределения молекул (рис. 2, 3), в которой выделяются быстрая и медленная стадии релаксационного процесса. Непосредственно за ударным фронтом (быстрая стадия) начинают быстро увеличиваться заселенности колебательных уровней, принадлежащих больцмановскому участку, причем функция распределения молекул на этих уровнях остается близкой к распределению Больцмана. Одновременно происходит эволюция триноровского участка и участка плато функции распределения. Начинает увеличиваться колебательная температура первого колебательного уровня T_v (рис. 4), определяющая вид триноровского участка, и увеличиваются заселенности отдельных групп промежуточных уровней при наличии неравновесности газа. Если у исходного распределения существовала абсолютная инверсия (случай «промежуточный неравновесности»), то за фронтом УВ инверсия возрастает (рис. 2). Если же исходное распределение относилось к случаю «сильной неравновесности», то УВ приводит к появлению абсолютной инверсии

заселенностей² (рис. 3). В случае «сильной неравновесности» большим значениям ξ_0 соответствует меньшая инверсия заселенностей.

Эволюцию бoльцмановского участка функции распределения можно объяснить следующим образом. Скачкообразное увеличение температуры газа от T_0 до T_1 в ударном фронте нарушает равновесие верхних колебательных уровней с поступательными и вращательными степенями свободы молекул. Быстрые процессы VT -обмена (для этой группы уровней VT -процессы доминируют над VV -обменом) приводят к увеличению заселенности верхних колебательных уровней при их релаксации к бoльцмановскому распределению с новым более высоким значением температуры газа. Несложно показать, что при этом поддерживается бoльцмановское распределение для верхних колебательных уровней.

Увеличение колебательной температуры первого уровня обусловлено VV -обменом, который определяет функцию распределения на нижних уровнях.

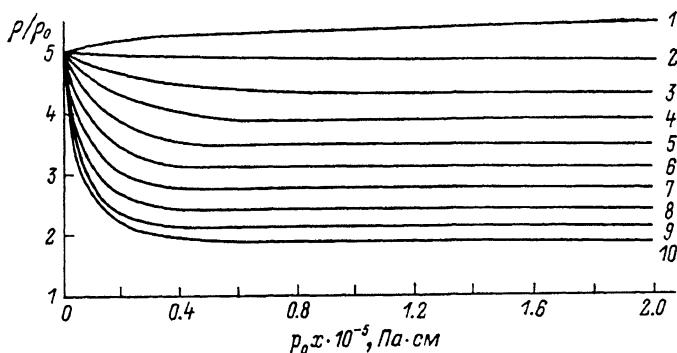


Рис. 5. Профили плотности газа в релаксационной зоне для различных значений ξ_0 . 1 — 0.00, 2 — 0.999, 3 — 2.007, 4 — 2.988, 5 — 4.010, 6 — 5.005, 7 — 6.036, 8 — 7.060, 9 — 7.980, 10 — 8.512; $T_0=300$ К, $M_0=5$.

При одноквантовом VV -обмене сохраняется число квантов [14] $Q = \sum_n n \delta_n$. Непосредственно за фронтом УВ при $x=0$ сохраняются относительные заселенности колебательных уровней, а повышение температуры нарушает равновесие по VV -обмену, формирующее триноровский участок. Используя сохранения числа квантов для триноровского участка функции распределения, можно получить уравнение, определяющее колебательную температуру T_V , соответствующую равновесию по VV -обмену при новой температуре газа $T > T_0$. Согласно работе [24], такое уравнение для $T > T_0$ дает $T_V^\ddagger > T_{V0}$. Таким образом, увеличение T_V связано с релаксацией триноровского участка к новому равновесному состоянию по VV -обмену.

Как уже отмечено, указанные процессы отвечают быстрой стадии эволюции функции распределения. При $\xi_0 \geq 1$ на этой стадии несмотря на увеличение заселенностей отдельных групп уровней в целом энергия колебаний молекул релаксирует в поступательные и вращательные степени свободы.

Дальнейшая эволюция функции распределения к равновесному состоянию происходит более медленно (медленная стадия) и качественно напоминает эволюцию квазистационарного распределения в изотермических условиях [14]. Однако в отличие от релаксации в изотермических условиях при достаточной начальной неравновесности ($\xi_0 \geq 1.0$) на этой стадии эволюции функции распределения продолжается рост колебательной температуры первого уровня. Так же как и на быстрой стадии процесса эволюции, увеличение T_V обязано VV -обмену и продолжается до тех пор, пока число квантов на нижних уровнях не начинает уменьшаться вследствие VT -релаксации. При $\xi_0 \geq 1$ первоначальное увеличение сменяется ее уменьшением на дистанциях $\rho_0 x_1 \sim (2-3) \cdot 10^{+3}$

² Возникновение абсолютной инверсии за фронтом УВ в колебательно-возбужденном газе впервые показано в работе [16]. Решение в [16] проведено в предположении, что УВ приводит к скачкообразному изменению температуры и давления на фронте, а дальнейшие процессы происходят в изотермических условиях.

Па·см (рис. 4). Этим дистанциям соответствует исчезновение участка «плато» на функции распределения молекул по колебательным уровням вследствие VT -релаксации. Отметим, также что $x_1 \sim v_{\tau_{VV}}$, где $\tau_{VV} = (Q_{10}N)^{-1}$.

Эволюция функции распределения молекул протекает одновременно с газодинамическими процессами, формирующими структуру релаксационной зоны УВ. Пространственные распределения плотности и температуры газа в релаксационной зоне за фронтом УВ, полученные в расчетах для различных значений параметра неравновесности газа ξ_0 , представлены на рис. 5, 6.

При $\xi_0 = 0$ наблюдается увеличение плотности и уменьшение температуры газа, что обусловлено возбуждением колебательных степеней свободы молекул. По мере увеличения ξ_0 увеличение плотности (уменьшение температуры) сменяется при $\xi_0 \approx 1.0$ уменьшением плотности (увеличением температуры), что

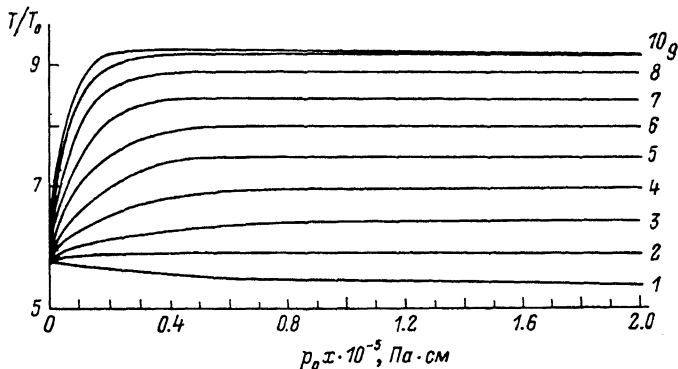


Рис. 6. Профили температуры газа в релаксационной зоне для различных значений ξ_0 . Параметры те же, что и на рис. 5.

вызвано выделением энергии за фронтом УВ за счет релаксации энергии колебаний молекул [8].

При достаточно больших значениях степени неравновесности газа распределение температуры газа за фронтом УВ имеет немонотонный характер. Такой ход температуры связан с особенностями газодинамического течения при подводе энергии в поступательные и вращательные свободы молекул в дозвуковом потоке, которым является течение в релаксационной зоне (более подробно см. [9, с. 506; 13]).

Подчеркнем, что участок немонотонного распределения температуры за фронтом УВ существует в достаточно узком диапазоне степеней неравновесности газа. Сверху диапазон значений степени неравновесности газа ограничен условием существования стационарной УВ [6-8], для $M_0 = 5$ $\xi_0 \leq 8.54$. При максимально возможной степени неравновесности газа УВ распространяется в режиме Чепмена—Жуге [9]. Снизу диапазон значений ξ_0 ограничен условием достижения за фронтом УВ скорости газа \bar{v} , при которой дальнейшее выделение энергии приводит к уменьшению температуры газа.

Определим отношение скорости \bar{v} к скорости Чепмена—Жуге и максимальное изменение температуры газа на участке немонотонности. Значение скорости Чепмена—Жуге соответствует обращению в нуль знаменателя уравнения (16)

$$v^* = \frac{\gamma r}{(\gamma + 1) j} \quad (21)$$

Температура газа в релаксационной зоне определяется выражением

$$T = \mu v (r - jv)/(kj), \quad (22)$$

откуда

$$\bar{v} = 0.5r/j, \quad (23)$$

а

$$\bar{v}/v^* = (\gamma + 1)/(2\gamma) = 0.8f. \quad (24)$$

Отношение максимальной $T_{\max} = T(\bar{v})$ и минимальной $T_{\min} = T(v^*)$ температур на участке немонотонности

$$T_{\max}/T_{\min} = (\gamma + 1)^2/(4\gamma) = 1.03. \quad (25)$$

Отметим, что возникновение инверсии заселенностей колебательных уровней получено в работе [16] в предположении об изотермичности за фронтом УВ. Наши расчеты показали, что на временах существования инверсии заселенностей температура газа успевает заметно измениться. Так, при $\xi_0 = 8.512$ температура газа изменяется на 8 %.

Предложенная на рис. 1 зависимость характерного времени релаксации энергии колебаний молекул от температуры газа и степени его неравновесности позволяет проводить расчеты сложных газодинамических течений колебательно-возбужденного молекулярного газа. Для оценки погрешности такого подхода на рис. 7 результаты решения системы уравнений (17)–(20) сравниваются с результатами, полученными на основе системы уравнений (15), (16). Из рис. 7

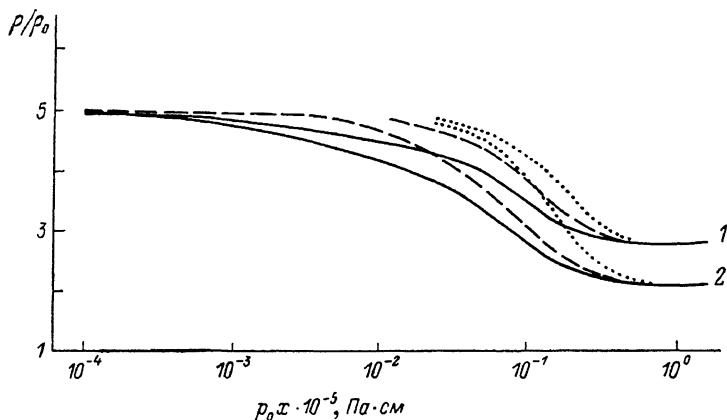


Рис. 7. Профили плотности газа в релаксационной зоне, полученные в расчетах по различным моделям.

Сплошные кривые — полная кинетическая модель, штриховые — упрощенная модель с учетом ангармоничности молекул, пунктир — в приближении гармонических осцилляторов. 1 — $\xi_0 = 6.036$, 2 — 7.980; $T_0 = 300$ К, $M_0 = 5$.

можно заключить, что обе модели дают качественно близкие пространственные распределения газодинамических параметров в релаксационной зоне УВ. Упрощенная модель вносит значительную погрешность на малых дистанциях за фронтом УВ, когда неравновесность газа еще высока, что связано с отличием функции распределения молекул по колебательным уровням в релаксационной зоне УВ от квазистационарной. Вместе с тем погрешность в определении толщины релаксационной зоны невелика и не превосходит 30 %. Под толщиной релаксационной зоны здесь принято расстояние, на котором плотность изменяется на 90 % от полного изменения. При $\xi_0 \leq 4.0$ ошибка не превышает 15 %. Сопоставление результатов кинетической и упрощенной модели с результатами, полученными в рамках модели гармонических осцилляторов, показывает, что использование зависимости τ для ангармонических осцилляторов предпочтительнее, чем для гармонических осцилляторов.

Следует отметить, что при значении числа Маха $M_0 = 5$ влияние ангармоничности колебаний молекул на структуру релаксационной зоны является максимальным. Расчеты с другими числами Маха показали, что при снижении M_0 по сравнению со значением $M_0 = 5$ снижается степень неравновесности газа ξ_0^* , при которой существуют стационарные УВ, а вместе с ней уменьшается количественное проявление ангармоничности. При увеличении числа Маха M_0 за фронтом УВ достигается более высокая температура газа, при которой влияние ангармоничности на процесс колебательной релаксации также ослабляется.

Выводы

Проведенное исследование позволяет сделать следующие выводы.

1. Непосредственно за фронтом УВ наблюдается быстрая перестройка функции распределения молекул по колебательным уровням, в процессе которой происходит увеличение заселенности верхних колебательных уровней.

2. В случае «сильной» начальной неравновесности газа [22] УВ приводит к возникновению абсолютной инверсии заселенности колебательных уровней. В случае «промежуточной» начальной неравновесности [22], когда инверсия обнаруживается в исходном состоянии газа, УВ усиливает величину инверсии. Величина достигаемой инверсии заселенностей уровней уменьшается с увеличением степени начальной неравновесности газа.

3. В релаксационной зоне за фронтом УВ пространственное распределение температуры первого колебательного уровня молекул носит немонотонный характер.

4. При высоких значениях начальной неравновесности газа распределение температуры газа может иметь немонотонный характер: температура газа за фронтом УВ растет, достигая максимума, и затем незначительно уменьшается. Относительное снижение температуры не превышает 3 % (для $\gamma=1.4$).

5. Упрощенный метод описания течения в релаксационной зоне вносит значительную погрешность при исследовании структуры релаксационной зоны УВ на малых дистанциях за фронтом УВ. В то же время погрешность в определении толщины релаксационной зоны не превышает 30 %. Это позволяет использовать предложенную зависимость времени релаксации энергии колебаний молекул от температуры и степени неравновесности для расчета газодинамических течений колебательно-неравновесного газа в случаях, когда тонкая структура релаксационной зоны УВ не является предметом специального изучения.

Авторы выражают благодарность В. В. Анфиногенову за ряд полезных обсуждений.

Список литературы

- [1] Русанов В. Д., Фридман А. А., Шолин Г. Б. // УФН. 1981. Т. 134. № 2. С. 185—235.
- [2] Азизов Р. И., Вакар А. К., Животов В. К. и др. // ЖТФ. 1985. Т. 55. Вып. 1. С. 79—82.
- [3] Норман Г. Э., Поллак Л. С., Сопин П. И., Сорокин Г. А. // Сигнетз соединений в плазме, содержащей углеводороды. М., 1985. С. 33—79.
- [4] Кириллов И. А., Русанов В. Д., Фридман А. А. // Химическая физика. 1985. Т. 4. № 1. С. 132—136.
- [5] Марголин А. Д., Шмелев В. М. // Физика горения и взрыва. 1978. Т. 14. № 1. С. 52—62.
- [6] Бунянова Е. А., Ловецкий Е. Е., Силаков В. П., Фетисов В. С. // Химическая физика. 1982. Т. 1. № 12. С. 1701—1702.
- [7] Силаков В. П., Фетисов В. С. // Химическая физика. 1983. Т. 2. № 1. С. 96—101.
- [8] Бахит Ф. Г., Мишин Г. И. // ЖТФ. 1983. Т. 53. Вып. 5. С. 854—857.
- [9] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Гидродинамика. М.: Наука, 1986. 736 с.
- [10] Рухадзе А. А., Силаков В. П., Чеботарев А. В. // Кр. сообщ. по физике. 1983. № 6. С. 18—23.
- [11] Востовский Г. В., Козлов Г. И. // ЖТФ. 1986. Т. 56. Вып. 8. С. 1536—1542.
- [12] Евтюгин Н. В., Марголин А. Д., Шмелев В. М. // Химическая физика. 1985. Т. 4. № 9. С. 1276—1280.
- [13] Осипов А. И., Уваров А. В. // Химическая физика. 1984. Т. 3. № 11. С. 1612—1615.
- [14] Гордиец Б. Ф., Осипов А. И., Шелепин Л. А. Кинетические процессы в газах и молекулярные лазеры. М.: Наука, 1980. 512 с.
- [15] Sergeev P. A., Slovetsky D. I. // Chem. Phys. 1983. Vol. 75. P. 231—241.
- [16] Лосев С. А., Макаров В. Н. // Квантовая электроника. 1985. Т. 12. № 8. С. 1628—1631.
- [17] Силаков В. П., Чеботарев А. В. // ПМТФ. 1986. № 5. С. 13—19.
- [18] Bray K. N. C. // J. Phys. B. 1968. Vol. 1. P. 705—717.
- [19] Гуреев К. Г., Золотарев В. О. // ТВТ. 1987. Т. 24. № 1. С. 155—157.
- [20] Gear C. W. // Comm. ACM. 1971. Vol. 14. P. 176—179.
- [21] Billing G. D., Fisher E. R. // Chem. Phys. 1979. Vol. 43. P. 395—401.
- [22] Ликальтер А. А., Найдис Г. В. // Химия плазмы. М.: Энергоиздат, 1981. Вып. 8. С. 156—189.
- [23] Treanor C. E., Rich J. W., Rehm R. G. // J. Chem. Phys. 1968. Vol. 48. P. 1798—1807.
- [24] Nanbu K. // J. Phys. Soc. Jap. 1976. Vol. 40. P. 1555—1558.

Поступило в Редакцию
20 мая 1988 г.

В окончательной редакции
15 декабря 1988 г.