

Translational Relaxation of the Rayleigh and Lorentz Gases in Shock Waves. Kinetic Description

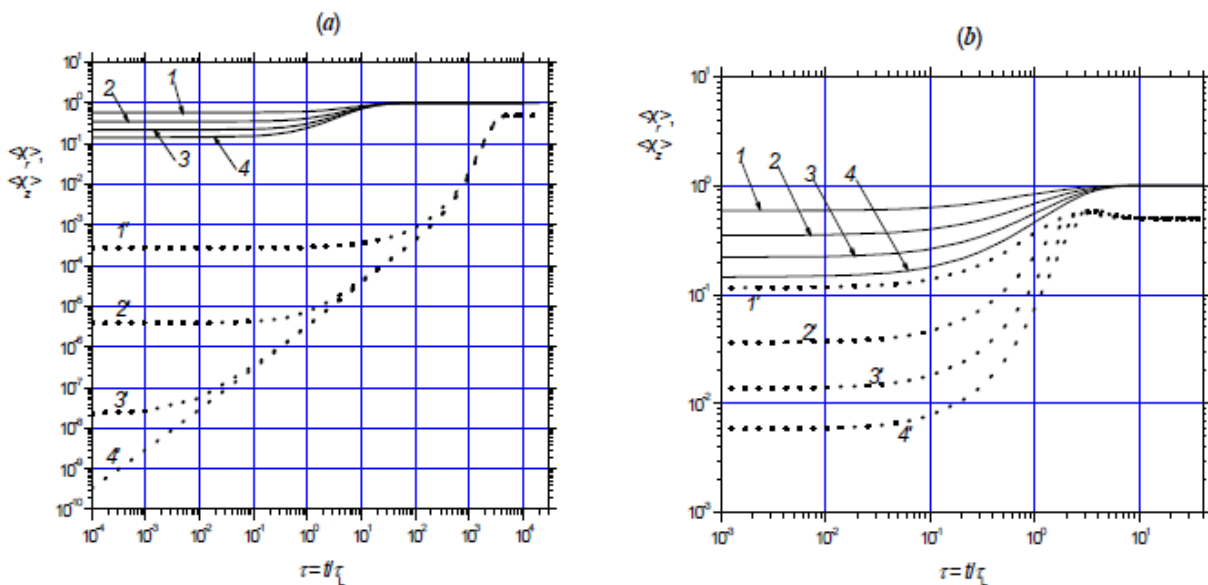
Oleg V. Skrebkov

Institute of Problem of Chemical Physics of Russian Academy of Sciences, Chernogolovka, Moscow Region, 142432, Russia
skreb@icp.ac.ru

Abstract

The kinetic equations describing the translational relaxation process in shock waves in extreme cases of the gas mixture: Rayleigh gas, i.e., a very dilute subsystem of heavy mass points dispersed in a heat bath of light particles, and Lorentz gas, i.e., a very dilute subsystem of light particles is dispersed in a heat bath of heavy particles, have been obtained. In contrast to existing ones, the equations take into account the fact that the problem of translational relaxation in the shock wave is not isotropic, namely, the direction of propagation of the shock wave is highlighted. The calculation results illustrate the radical difference between the process of translational relaxation in the flow behind the shock wave for the Lorentz and Rayleigh gases, which, in the latter case, has a substantially two-dimensional nature.

Keywords: translational relaxation, gas mixture, shock wave, kinetic equations.



Dependences of the transverse, $\langle x_r \rangle$ (the curves 1 - 4), and longitudinal, $\langle x_z \rangle$ (the curves 1' - 4'), components of the dimensionless average energy for the following cases: (a) is the Rayleigh gas (admixture Xe in He); (b) is the Lorentz gas (admixture He in Xe).

The initial conditions correspond to the following Mach numbers: 2 (the curves 1, 1'), 3 (the curves 2, 2'), 4 (the curves 3, 3'), and 5 (the curves 4, 4').

УДК 533.7

Поступательная релаксация газов Релея и Лоренца в ударных волнах. Кинетическое описание

О.В. Скребков

*Институт проблем химической физики РАН, 142432, Черноголовка.
skreb@icp.ac.ru*

Аннотация

Получены кинетические уравнения, описывающие процесс поступательной релаксации в ударных волнах в предельных случаях газовых смесей: газ Релея – малая примесь тяжелых частиц в термостате газа из частиц малой массы и газ Лоренца – малая примесь легких частиц в термостате тяжелых частиц. В отличие от существующих полученные уравнения учитывают то обстоятельство, что задача о поступательной релаксации в ударной волне не является изотропной, а именно: выделено направление распространения ударной волны. Представлены результаты расчетов, иллюстрирующие радикальное различие процесса поступательной релаксации в потоке за фронтом ударной волны в газах Лоренца и Релея, который в последнем случае имеет существенно двумерный характер.

Ключевые слова: поступательная релаксация, газовая смесь, ударная волна, кинетические уравнения

1. Введение

Процесс поступательной релаксации является одним из самых быстрых в физико-химической кинетике газовых и других, подобных газовым, системах. Роль этого процесса становится существенной или даже определяющей на временах порядка $10^{-8} \div 10^{-10}$ с. Столь малые времена в настоящее время стали весьма привычным делом в практике теоретических и экспериментальных исследований; с этим обстоятельством, по-видимому, связано увеличение исследовательского интереса к этому процессу в последние годы (см., например, [1] и ссылки там).

Детальное теоретическое исследование процесса поступательной релаксации в газовой смеси требует решения соответствующей системы уравнений Больцмана (см. [1, 2] и ссылки там). По мере усложнения исследуемых систем (а практический интерес представляют именно такие системы) резко возрастают трудности постановки и решения такого рода задач. Поэтому в последние десятилетия, благодаря развитию вычислительных средств, широкое распространение получили различные варианты методов статистического моделирования, позволяющие исследовать поступательную неравновесность в сравнительно сложных системах, не решая непосредственно кинетического уравнения. Обладая целым рядом достоинств, эти методы, однако, имеют один общий недостаток, а именно: экспоненциальный рост объема вычислений при расчете так называемых "хвостов функций распределения". Даже при наличии современных вычислительных средств это обстоятельство существенно ограничивает или делает неопределенной область их применимости.

Данная работа посвящена исследованию поступательной релаксации непосредственно за фронтом ударной волны в газе посредством кинетического описания, т.е., путем формулировки и решения соответствующего кинетического уравнения. Это может быть применимо, в частности, для тестирования (в простейших предельных случаях) результатов, полу-

ченных методами численного моделирования, которые (применительно к газовой фазе) по-прежнему остаются трудоемкими и, часто, не удовлетворительными по точности. Формулировка кинетической задачи основана на методах и подходах, разработанных в работах [3–7] (см., также, [8]), но с учетом того обстоятельства, что задача о поступательной релаксации в ударной волне не является изотропной в пространстве импульсов и/или энергий, а именно: выделено направление распространения ударной волны.¹ Рассматриваются следующие два предельных случая газовых смесей: газ Релея – малая² примесь тяжелых частиц в термостате газа из частиц малой массы и газ Лоренца – малая примесь легких частиц в термостате тяжелых частиц. В этих случаях система уравнений Больцмана для бинарной газовой смеси сводится к одному уравнению для примеси, которое при достаточно малой концентрации молекул примеси линеаризуется. Вследствие малости изменения энергии при столкновении частиц, сильно различающихся по массе, становится возможным переход от интегро-дифференциального уравнения Больцмана к дифференциальному уравнению Фоккера-Планка (диффузионное приближение [2]).

2. Кинетическое уравнение в пространстве скоростей

Рассматривается пространство, в котором по прямоугольным осям координат отложены компоненты вектора скорости частицы примеси \vec{c} . Через $f(\vec{c}, t)$ обозначим плотность распределения молекул в этом пространстве. В нашем случае (пространственно однородный газ в отсутствие внешних сил) уравнение Больцмана для f при достаточно малой концентрации молекул примеси линейно относительно f и может быть записано в виде:

$$\frac{\partial f(\vec{c}, t)}{\partial t} = -f(\vec{c}, t) \int w(\vec{c}, \vec{\Delta}) d\vec{\Delta} + \int f(\vec{c} + \vec{\Delta}, t) w(\vec{c} + \vec{\Delta}, -\vec{\Delta}) d\vec{\Delta} \quad (1)$$

Здесь $w(\vec{c}, \vec{\Delta})$ - вероятность изменения \vec{c} на $\vec{\Delta}$ при столкновении с молекулами газа, который играет роль термостата с температурой T ,

$$\vec{\Delta} = \vec{c}' - \vec{c}, \quad \int w(\vec{c}, \vec{\Delta}) d\vec{\Delta} = N,$$

N - частота столкновений молекул примеси с молекулами термостата.

Соответствующее (1) дифференциальное уравнение Фоккер-Планка, в векторной форме будет иметь следующий вид (см. [3, 5, 8]):

$$\frac{\partial f(\vec{c}, t)}{\partial t} = \text{div } \vec{j}, \quad \vec{j} = f^{(0)}(\vec{c}) \mathbf{B}(\vec{c}) \frac{\partial}{\partial \vec{c}} \left[\frac{f(\vec{c}, t)}{f^{(0)}(\vec{c})} \right]. \quad (2)$$

Здесь $f^{(0)}(\vec{c}) = f(\vec{c}, \infty)$ – равновесная функция распределения, соответствующая температуре $T|_{t \rightarrow \infty}$, а $\mathbf{B}(\vec{c})$ - тензор с компонентами

$$B_{ik}(\vec{c}) = \frac{1}{2} \int \Delta_i \Delta_k w(\vec{c}, \vec{\Delta}) d\vec{\Delta} \equiv \frac{1}{2} \int \Delta_i \Delta_k dN, \quad \int dN = N,$$

где $i, k = x, y, z$; Δ_i – компоненты вектора $\vec{\Delta}$. Диагональные элементы тензора \mathbf{B} определяют средний на столкновение квадрат изменения скорости молекулы примеси при ее столкновении с молекулами термостата. Конкретный вид тензорного коэффициента \mathbf{B} определяется видом потенциала взаимодействия и находится из решения соответствующей динамической задачи.

¹ Другим примером такого рода является движение ионов в электрически нейтральном газе под действием электрического поля [7] (выделено направление электрического поля).

² Столкновениями частиц примеси между собой можно пренебречь.

Тензор $\mathbf{B}(\vec{c})$ в общем виде (безотносительно к соотношению масс молекул примеси и термостата) как результат решения динамической задачи о столкновении частиц, взаимодействующих по потенциалу жестких упругих сфер, определяется следующими соотношениями (см. Приложение):

$$B_{ik} = b \left[p(c) \delta_{ik} + q(c) \frac{c_i c_k}{c^2} \right], \quad b = b_1 \left(\frac{m}{M+m} \right)^2, \quad b_1 = \frac{\sqrt{\pi}}{3} n_2 \sigma_{12}^2,$$

$$p(c) = \left(c^3 + \frac{9}{2} \alpha c + \frac{9}{4} \frac{\alpha^2}{c} - \frac{3}{8} \frac{\alpha^3}{c^3} \right) E_1(x_1) + \left(\frac{1}{2} \alpha^{1/2} c^2 + 2\alpha^{3/2} + \frac{3}{8} \frac{\alpha^{5/2}}{c^2} \right) e^{-x_1^2}, \quad (3)$$

$$q(c) = \left(3c^3 + \frac{9}{2} \alpha c - \frac{9}{4} \frac{\alpha^2}{c} + \frac{9}{8} \frac{\alpha^3}{c^3} \right) E_1(x_1) + \left(\frac{3}{2} \alpha^{1/2} c^2 + \frac{3}{2} \alpha^{3/2} - \frac{9}{8} \frac{\alpha^{5/2}}{c^2} \right) e^{-x_1^2},$$

$$\alpha = 2kT/m, \quad x_1 = c/\alpha^{1/2}, \quad E_1(x_1) = \int_0^{x_1} e^{-x^2} dx.$$

Здесь M – масса молекул примеси; n_2 и m – концентрация и масса молекул термостата; σ_{12} – эффективный радиус взаимодействия.

Граничные условия, отвечая условию сохранения числа частиц, имеют вид $j = 0$ на границах, т.е.,

$$j \Big|_{k=0}^{k \rightarrow \infty} = 0, \quad (k = x, y, z).$$

В качестве начальных условий требуется задать функцию распределения частиц примеси непосредственно за фронтом ударной волны, $f(\vec{c}, 0)$. В системе координат связанной с потоком «горячего» газа – термостата это поток частиц малой примеси с температурой T_0 в направлении противоположном направлению распространения ударной волны (u – средняя скорость потока, T – температура); шириной скачка по газу термостата и релаксацией примеси на ширине скачка пренебрегаем. Соответствующее максвелловское распределение, нормированное на 1, имеет вид (потокковая составляющая направлена по оси z):

$$f(\vec{c}, 0) = \left(\frac{M}{2\pi k T_0} \right)^{3/2} \exp \left\{ -\frac{M}{2k T_0} \left[c_x^2 + c_y^2 + (c_z + u)^2 \right] \right\}.$$

В данной работе уравнение (2) рассматривается в следующих двух случаях:

- 1) случай сферической симметрии (1D - задача), когда газовая смесь как целое покоится (пространство скоростей однородно и изотропно, $u = 0$);
- 2) случай цилиндрической симметрии, когда газ частиц малой примеси имеет потокковую составляющую $u \neq 0$ в направлении противоположном направлению распространения ударной волны (2D - задача).

3. Одномерная (1D) задача (Случай сферической симметрии. Газ как целое покоится.)

В сферических координатах - $c_x = c \sin \theta \cos \varphi$, $c_y = c \sin \theta \sin \varphi$, $c_z = c \cos \theta$, $0 < c < \infty$, $0 < \theta < \pi$, $0 < \varphi < 2\pi$ - после усреднения по углам и перехода к энергии $E = Mc^2/2$ уравнение (2) в безразмерных переменных $\tau = t/\tau_1$ и $x = E/kT$, с учетом соотношения $4\pi c^2 f(\vec{c}, t) dc = F(x, t) dx$, принимает следующий вид:

$$\frac{\partial F(x, \tau)}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial x} \left\{ B(x) \left[2x \frac{\partial F}{\partial x} + (2x-1)F \right] \right\} \quad (4)$$

Коэффициент диффузии $B(x)$ является скалярной функцией безразмерной энергии x и параметра $\varepsilon = m/M$.

$$B(x) = \left[2(\varepsilon x)^{3/2} + 6(\varepsilon x)^{1/2} + \frac{3}{2}(\varepsilon x)^{-1/2} \right] E_1(\sqrt{\varepsilon x}) + \left(\varepsilon x + \frac{5}{2} \right) e^{-\varepsilon x} \quad (5)$$

Рис. 1 иллюстрирует зависимости коэффициента диффузии $B(x, \varepsilon)$ от x при различных значениях параметра ε : $\varepsilon \ll 1$ (газ Релея) и $\varepsilon \gg 1$ (газ Лоренца). Значения $\varepsilon = 0.03$ (кривая 2R) и $\varepsilon = 33$ (кривая 2L) отвечают газовым смесям: малая примесь молекул Хе в термостате молекул Не и малая примесь молекул Не в термостате молекул Хе, соответственно.

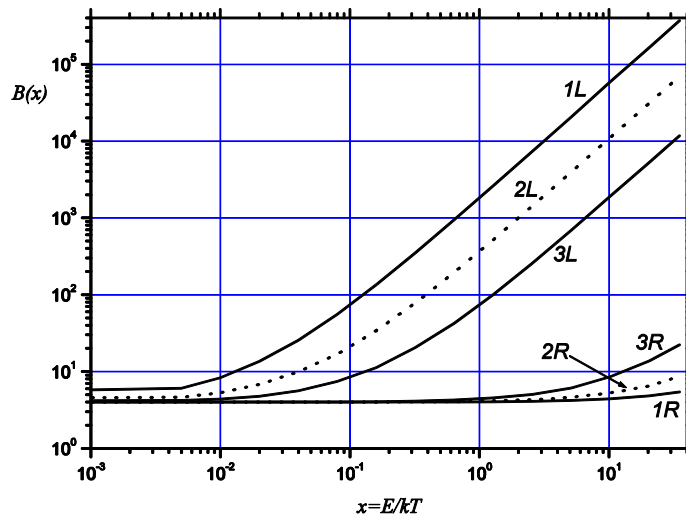


Рис. 1. Зависимости $B(x)$ для различных ε : $\varepsilon = 0.01$ (1R); 0.03 (2R); 0.1 (3R); 100 (1L); 33 (2L); 10 (3L)

Граничные условия, отвечающие условию сохранения числа частиц, имеют вид $j = 0$ на границах энергетического пространства, т.е.,

$$\left\{ B(x) \left[2x \frac{\partial F}{\partial x} + (2x-1)F \right] \right\} \Big|_{x=0}^{x \rightarrow \infty} = 0 \quad (6)$$

Начальное условие: $F(x, 0) = \Psi(x)$.

Величина $\tau_1 = 0.5b_1^{-1} \alpha^{-1/2} \varepsilon^{-1} (1 + \varepsilon)^2$ имеет размерность времени и является временным масштабом задачи; τ_1 можно связать со средним временем между столкновениями, τ_L [9].

$$\frac{\tau_1}{\tau_L} = 3 \frac{(1 + \varepsilon)^{5/2}}{\varepsilon} \quad (7)$$

В случае газа Релея для интервала энергий частиц примеси $x \ll 1/\varepsilon$ коэффициент «диффузии» $B(x) \approx \text{const}$. В этом случае ($M \gg m$) из общей формулы (5), если ограничиться первыми членами разложений $\exp(-\varepsilon x) \approx 1 - \varepsilon x$ и $E_1(\sqrt{\varepsilon x}) \approx \sqrt{\varepsilon x} [1 - (\varepsilon x)/2]$ приходим к полученному ранее в работах [4, 5] результату $B(x) \approx 4 = \text{const}$.

$$B(x) \approx \left[4 + \frac{15}{4} \varepsilon x \right] \approx B(x)|_{x=0} = 4 = \text{const}.$$

Уравнение (4) при $B(x) = \text{const}$ имеет аналитическое решение в виде ряда по полиномам Лагерра [4, 5, 10]. Общее решение, удовлетворяющее начальным и граничным условиям, имеет вид:

$$F(x, \tau) = x^{1/2} e^{-x} \sum_{n=0}^{\infty} C_n L_n^{(1/2)}(x) e^{-na\tau}, \quad a = (8/3)\varepsilon, \tau = t / \tau_L,$$

$$C_n = \frac{n! 2^{n+1}}{\sqrt{\pi} \cdot 1 \cdot 3 \cdot 5 \cdot \dots \cdot (2n+1)} \int_0^{\infty} L_n^{(1/2)}(x) \Psi(x) dx;$$

полиномы Лагерра $L_n^{(s)}$ вычисляются с помощью рекуррентных соотношений:

$$L_0^{(s)} = 1, L_1^{(s)} = -x + (s-1), L_{n+1}^{(s)} = \frac{2n+s+1-x}{n+1} L_n^{(s)} - \frac{n+s}{n+1} L_{n-1}^{(s)}.$$

Если начальная функция распределения $\Psi(x)$ имеет вид максвелловского распределения с температурой T_0 , т.е.,

$$\Psi(x) = \frac{2\gamma_0}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\gamma_0 x} e^{-\gamma_0 x}, \quad \gamma_0 = T / T_0,$$

Решение уравнения (4) удовлетворяет граничным условиям (6) и имеет вид:

$$F(x, \tau) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} x^{1/2} [\gamma(\tau)]^{3/2} e^{-\gamma(\tau)x}, \quad \gamma(\tau) = \gamma_0 [\gamma_0 + (1 - \gamma_0) e^{-a\tau}]^{-1}.$$

Это значит, что в процессе релаксации сохраняется максвелл-больцмановский вид распределения с температурой, $T(\tau) = T / \gamma(\tau) = T + (T_0 - T) \exp(-a\tau)$, изменяющейся во времени (свойство канонической инвариантности [2]). В общем случае кинетического коэффициента $B(x)$ в виде (5) уравнение (4) требует численного решения.

Поведение функции распределения $F(x, \tau)$ ³ в случаях $\varepsilon = 0.03$ (релаксация малой примеси «холодных» молекул Хе в термостате «горячих» молекул Не) и $\varepsilon = 33$ (релаксация малой примеси «холодных» молекул Не в термостате «горячих» молекул Хе) иллюстрируется рис. 2 (а) и 2 (б), соответственно.

Из сравнения рис. 2 (а) и 2 (б) можно видеть количественное и качественное различие в поведении функций распределения газов Релея и Лоренца при релаксации, обусловленное различием зависимостей $B(x)$. Сравните кривые $2L$ и $2R$ на рис. 1.

Процесс релаксации (термализации) ансамбля примесных частиц в целом (на гидродинамическом уровне описания) характеризуется зависимостью от времени средней энергии частиц примеси $\langle x \rangle = \langle E \rangle / kT$,

$$\langle x \rangle = \int_0^{\infty} x F(x, \tau) dx, \quad \langle x \rangle \Big|_{\tau \rightarrow \infty} = 3/2.$$

Зависимости $\langle x \rangle$ от времени $\tau = t / \tau_L$ для различных значений параметра ε приведены на рис. 3, из которого можно видеть, что процесс релаксации легких частиц в термостате тяжелых (газ Лоренца) протекает на порядок быстрее процесса релаксации тяжелых частиц в термостате легкого газа (газ Релея); см. также рис. 2.

³ Как результат численного решения. Для решения системы разностных уравнений неявной схемы использовался метод прогонки (см., например, [10]).

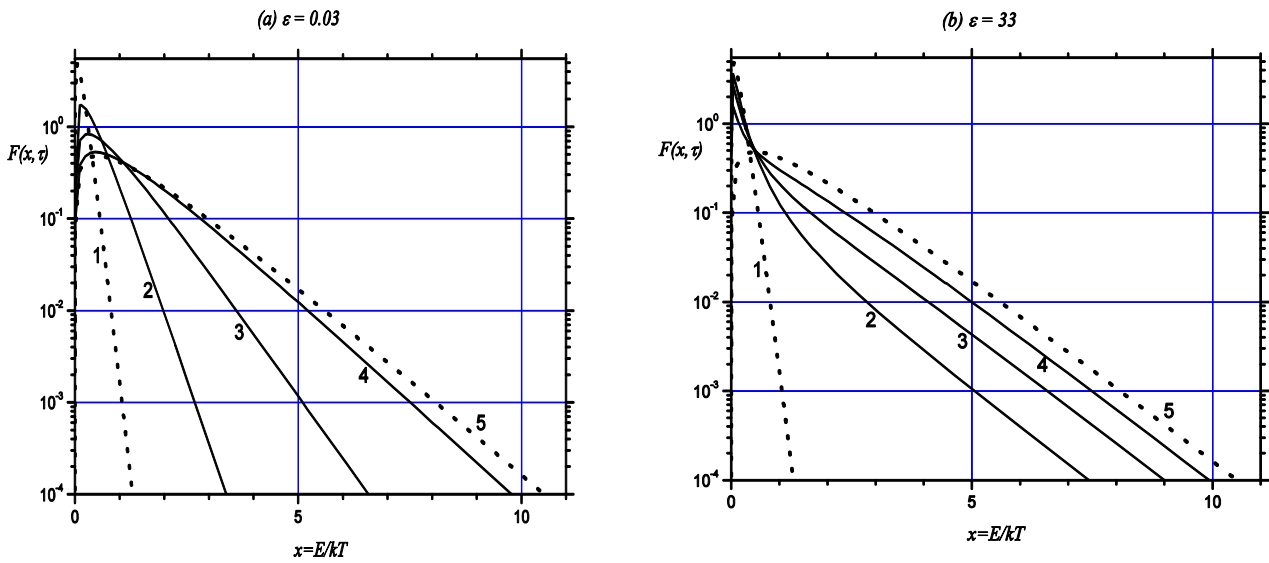


Рис. 2. Функция распределения $F(x, \tau)$ в различные моменты времени $\tau = t/\tau_L$ для случаев $\varepsilon = 0.03$ (a) и $\varepsilon = 33$ (b).

(a) $\tau = 0$ (1); 3 (2); 10 (3); 30 (4); ∞ (5).

(b) $\tau = 0$ (1); 0.5 (2); 1 (3); 2 (4); ∞ (5)

Отметим здесь, что изменение порядка расположения кривых $1L$, $2L$ и $3L$ (сравните с рис. 1) является следствием изменения временного масштаба τ_1 в уравнении (4) на τ_L в соответствии с соотношением (7).

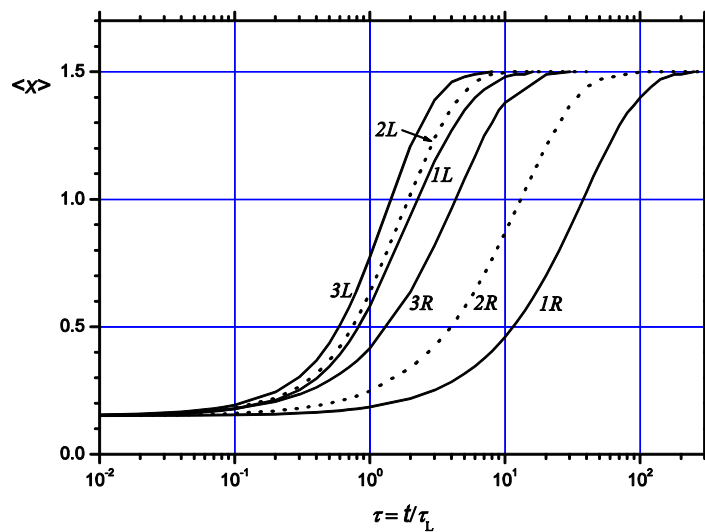


Рис. 3. Зависимости $\langle x \rangle$ от времени $\tau = t/\tau_L$ для различных значений параметра ε : $\varepsilon = 0.01$ (1R); 0.03 (2R); 0.1 (3R); 100 (1L); 33 (2L); 10 (3L); $T/T_0 = 10$

4. Двумерная (2D) задача (Поступательная релаксация за фронтом ударной волны)

После перехода в векторном уравнении (2) к цилиндрическим координатам $c_x = c_r \cos \varphi$; $c_y = c_r \sin \varphi$; $c_z = c_z$; $c^2 = c_r^2 + c_z^2$; $0 \leq \varphi \leq 2\pi$; усреднения по углу φ и после соответствующих преобразований приходим к следующей формулировке двумерной задачи в координатах $x_r = E_r/kT$; $x_z = E_z/kT$ ($E_r = Mc_r^2/2$; $E_z = Mc_z^2/2$):

$$\frac{\partial f(x_r, x_z; \tau)}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial x_r} \left\{ 2x_r B_r \left[\frac{\partial f}{\partial x_r} + f \right] \right\} + \frac{\partial}{\partial x_z} \left\{ B_z \left[2x_z \frac{\partial f}{\partial x_z} + (2x_z + 1)f \right] \right\};$$

или, относительно функции $\Phi(x_r, x_z; \tau) = f(x_r, x_z; \tau) / f^{(0)}$, $f^{(0)} \equiv f(x_r, x_z; \infty)$ (что удобно при проведении численного расчета):

$$f^{(0)} \cdot \frac{\partial \Phi(x_r, x_z; \tau)}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial x_r} \left\{ 2x_r B_r f^{(0)} \frac{\partial \Phi}{\partial x_r} \right\} + \frac{\partial}{\partial x_z} \left\{ 2x_z B_z f^{(0)} \frac{\partial \Phi}{\partial x_z} \right\}, \quad (8)$$

$f^{(0)}(x_r, x_z) = C x_z^{-1/2} \exp(-x_r - x_z)$; C – нормировочная (при нормировании на 1) постоянная. Соответственно, вместо (3) имеем:

$$B_r(x_r, x_z) = p(x) + \frac{q(x)}{x} x_r, \quad B_z(x_r, x_z) = p(x) + \frac{q(x)}{x} x_z, \quad x = x_r + x_z,$$

$$p(x) = \left[(\varepsilon x)^{3/2} + \frac{9}{2}(\varepsilon x)^{1/2} + \frac{9}{4}(\varepsilon x)^{-1/2} - \frac{3}{8}(\varepsilon x)^{-3/2} \right] E_1(\sqrt{\varepsilon x}) + \left[\frac{1}{2}\varepsilon x + 2 + \frac{3}{8}(\varepsilon x)^{-1} \right] e^{-\varepsilon x},$$

$$q(x) = \left[3(\varepsilon x)^{3/2} + \frac{9}{2}(\varepsilon x)^{1/2} - \frac{9}{4}(\varepsilon x)^{-1/2} + \frac{9}{8}(\varepsilon x)^{-3/2} \right] E_1(\sqrt{\varepsilon x}) + \left[\frac{3}{2}\varepsilon x + \frac{3}{2} - \frac{9}{8}(\varepsilon x)^{-1} \right] e^{-\varepsilon x}$$

Граничные условия, отвечающие условию сохранения числа частиц (поток через границы энергетического пространства равен 0), имеют вид:

$$\left\{ 2x_r B_r f^{(0)} \frac{\partial \Phi}{\partial x_r} \right\} \Bigg|_{x_r=0}^{x_r \rightarrow \infty} = 0, \quad \left\{ 2x_z B_z f^{(0)} \frac{\partial \Phi}{\partial x_z} \right\} \Bigg|_{x_z=0}^{x_z \rightarrow \infty} = 0 \quad (9)$$

Начальному распределению частиц примеси (температура T_0) в системе координат связанной с потоком газа – термостата (температура T) за ударной волной, при нормировании на 1 (потоковая составляющая направлена по оси z), соответствует

$$\Phi(x_r, x_z; 0) = \gamma^{3/2} \cdot \exp \left[x_z - (\gamma - 1)x_r - \gamma \left(\sqrt{x_z} + \sqrt{x_f} \right)^2 \right], \quad \gamma = T/T_0, \quad x_f = \frac{Mu^2}{2kT}. \quad (10)$$

Информация об ударной волне входит в начальное условие через скорость потока, u , и температуры T_0 и T . В системе координат, связанной с потоком за ударной волной, газ – термостат находится в покое в равновесном состоянии при температуре T . Начальное распределение частиц малой примеси (10) соответствует максвелловскому распределению, соответствующему температуре T_0 , сдвинутому по координате x_z на величину $\sqrt{x_f}$, пропорциональную средней скорости u потока частиц примеси. Связь между величинами u , T_0 , T и скоростью ударной волны определяем соотношениями Ренкина – Гюгонио (см., например, [11]) для стационарной плоской ударной волны, распространяющейся по одноатомному газу - термостату:

$$\gamma \equiv \frac{T}{T_0} = \frac{\left(\frac{5}{3}M_1^2 - \frac{1}{3} \right) \left(\frac{1}{3}M_1^2 + 1 \right)}{\left(\frac{4}{3}M_1 \right)^2}, \quad |u| = \frac{3}{4} (M_1 - M_1^{-1}) a_1, \quad x_f = \frac{5}{8} (M_1 - M_1^{-1})^2 \cdot (\varepsilon \gamma)^{-1}.$$

Здесь M_1 и $a_1 = \sqrt{\frac{5kT_0}{3m}}$ - число Маха ударной волны и скорость звука в газе – термостате перед ударной волной, соответственно. Приведенная ниже таблица иллюстрирует в качестве примера зависимости от числа Маха M_1 величин γ и x_f для конкретных значений параметра ε . Здесь значения $\varepsilon=0.05$ и $\varepsilon=21$ отвечают газовым смесям Kr в He и He в Kr, соответственно.

Таблица

Зависимости от числа Маха перед ударной волной, M_1 , величин γ и x_f для различных значений параметра ε .

M_1	$\gamma = T/T_0$	$x_f(\varepsilon = 0.03)$	$x_f(\varepsilon = 0.05)$	$x_f(\varepsilon = 33)$	$x_f(\varepsilon = 21)$
1.5	1.49	7.3	4.36	0.007	0.01
2.0	2.08	17.0	10.2	0.015	0.02
3.0	3.67	30.3	18.2	0.028	0.04
4.0	5.86	37.5	22.5	0.034	0.05
5.0	8.68	41.56	24.9	0.038	0.05

Уже из начальных условий можно видеть, что двумерный характер значительно более ярко выражен в газах Релея, нежели в газах Лоренца (сравните соответствующие значения x_f для случаев $\varepsilon \ll 1$ и $\varepsilon \gg 1$).

На рис. 4 и 5 приведены зависимости $B_r(x_r, x_z)$ и $B_z(x_r, x_z)$ для значений параметра $\varepsilon=0.03$ (газ Релея) и $\varepsilon = 33$ (газ Лоренца) отвечающие газовым смесям: малая примесь молекул Хе в термостате молекул Не и малая примесь молекул Не в термостате молекул Хе, соответственно.

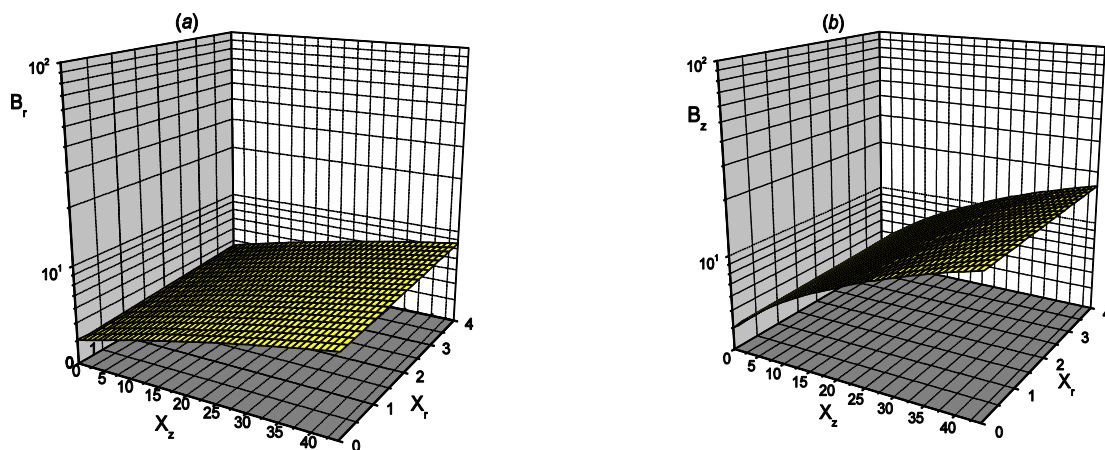
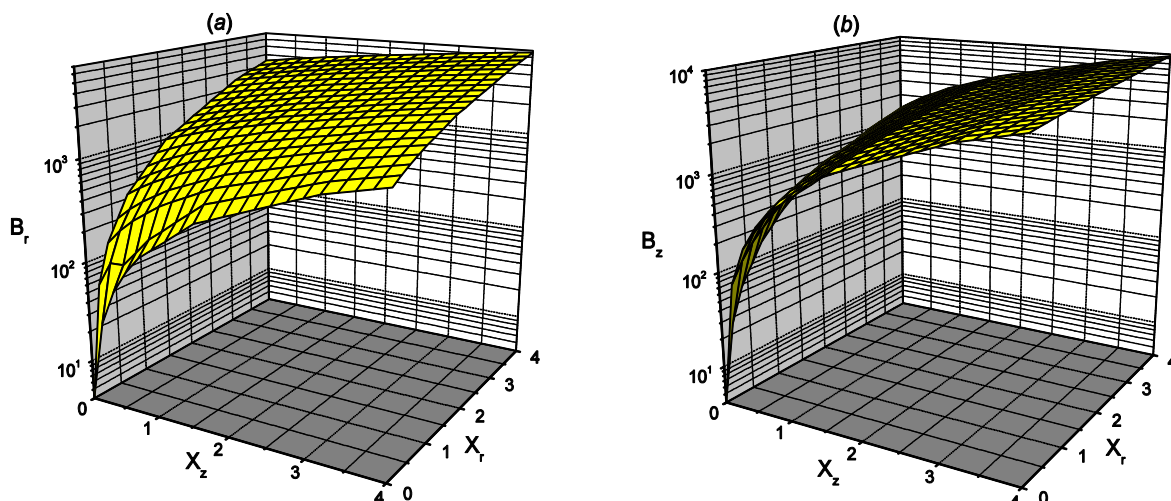


Рис. 4. Зависимости B_r (a) и B_z (b) для $\varepsilon = 0.03$ (Хе в Не)

Отметим здесь, что, как и в 1D случае для $B(x)$ (см. рис. 1), при высоких энергиях x_r и x_z наблюдается монотонный характер зависимостей $B_r(x_r, x_z)$ и $B_z(x_r, x_z)$, а именно: более высоким энергиям отвечают более высокие скорости релаксации. Последнее означает, что начальные сверхравновесные значения высокоэнергетических «хвостов» функции распределения (при их наличии) в процессе релаксации могут только уменьшаться.


 Рис. 5. Зависимости B_r (a) и B_z (b) для $\varepsilon = 33$ (He в Хе)

Поведение ⁴ функции $\Phi(x_r, x_z; \tau) = f(x_r, x_z; \tau) / f^{(0)}$, $f^{(0)} \equiv f(x_r, x_z; \infty)$, в случаях $\varepsilon = 0.03$ (релаксация малой примеси «холодных» молекул Хе в термостате «горячих» молекул He) и $\varepsilon = 33$ (релаксация малой примеси «холодных» молекул He в термостате «горячих» молекул Хе) иллюстрируется рис. 6 (a) – 6 (d) и 7 (a) – 7 (d), соответственно.

На рис. 8 (a) и 8 (b) приведены зависимости от времени $\tau = t / \tau_L$ средних энергий

$$\langle x_r \rangle = \int_0^\infty dx_r \int_0^\infty dx_z x_r f(x_r, x_z; \tau), \quad \langle x_r \rangle \Big|_{\tau \rightarrow \infty} = 1,$$

и

$$\langle x_z \rangle = \int_0^\infty dx_r \int_0^\infty dx_z x_z f(x_r, x_z; \tau), \quad \langle x_z \rangle \Big|_{\tau \rightarrow \infty} = 1/2,$$

характеризующие процесс релаксации (термализации) ансамбля примесных частиц в целом (на гидродинамическом уровне описания) поперечной $\langle x_r \rangle$ и продольной $\langle x_z \rangle$ составляющих средней энергии поступательного движения.

При равновесии ($t \rightarrow \infty$), как и положено, имеем

$$\langle x_r \rangle \Big|_{\tau \rightarrow \infty} + \langle x_z \rangle \Big|_{\tau \rightarrow \infty} = 3/2,$$

в соответствие с хорошо известным в равновесной статистической физике соотношением $\langle Mc^2 / 2 \rangle = (3/2)kT$.

Двумерный характер процесса выражается в различии времен термализации поперечной $\langle x_r \rangle$ и продольной $\langle x_z \rangle$ составляющих средней энергии поступательного движения; как видно из сравнения рис. 8 (a) и 8 (b), он значительно более ярко выражен в газах Релея нежели в газах Лоренца. В данном примере (малая примесь Хе в He) это различие достигает двух порядков по величине. Смотрите, также, соответствующие времена на рис. 6 (d) и 7(d).

⁴ Как результат численного решения. Для решения системы разностных уравнений использовался неявный метод переменных направлений (прогонка вдоль строк и вдоль столбцов); см., например, [10]).

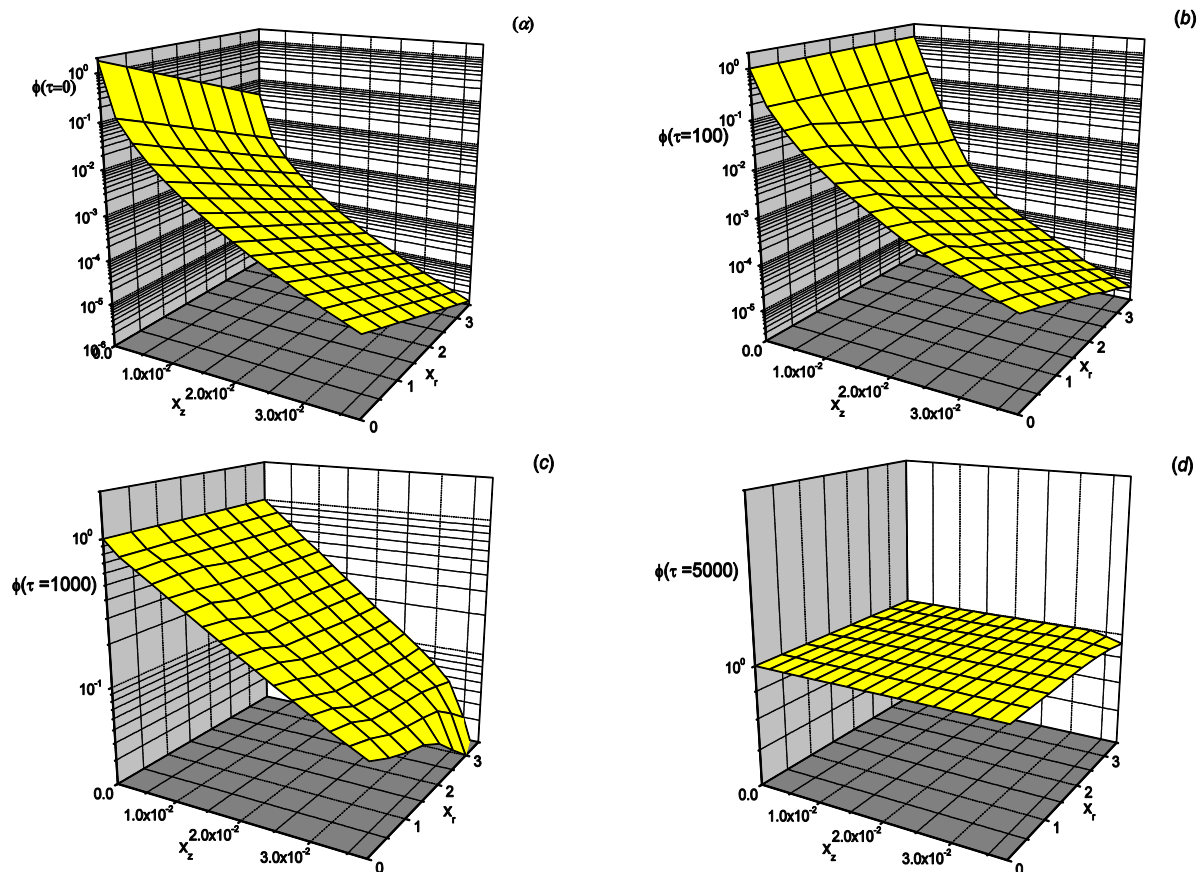


Рис. 6. Функция $\Phi(x_r, x_z; \tau) = f(x_r, x_z; \tau) / f^{(0)}$, $f^{(0)} \equiv f(x_r, x_z; \infty)$, в различные моменты времени $\tau = t / \tau_L$ для случая $\varepsilon = 0.03$; $M_1 = 2$; $\tau = 0$ (a); 100 (b); 1000 (c) и 5000 (d). (Изображена область вблизи точки $x_r = x_z = 0$. Необходимую точность обеспечивали следующие размеры области расчета: $0 \leq x_r \leq 8$, $0 < x_z \leq 20$.)

Заключение

Получены кинетические уравнения, описывающие процесс поступательной релаксации в ударных волнах в предельных случаях газовых смесей: газ Релея – малая примесь тяжелых частиц в газе из частиц малой массы и газ Лоренца – малая примесь легких частиц в газе тяжелых частиц. В отличие от существующих [4, 5, 7], полученные уравнения учитывают то обстоятельство, что задача о поступательной релаксации в ударной волне не является изотропной, а именно: выделено направление распространения ударной волны.

В случае газа Лоренца сдвиг начального распределения по координате, совпадающей с направлением распространения ударной волны мал, и с приемлемой точностью достаточно одномерного описания процесса. Это обстоятельство может быть использовано в дальнейшем при обобщении задачи на более сложные случаи, когда размерность задачи будет увеличиваться.

Процесс поступательной релаксации в газе Релея, обладая цилиндрической симметрией, является существенно двумерным; различие времен термализации поперечной и продольной составляющих средней энергии поступательного движения может различаться на порядки по величине.

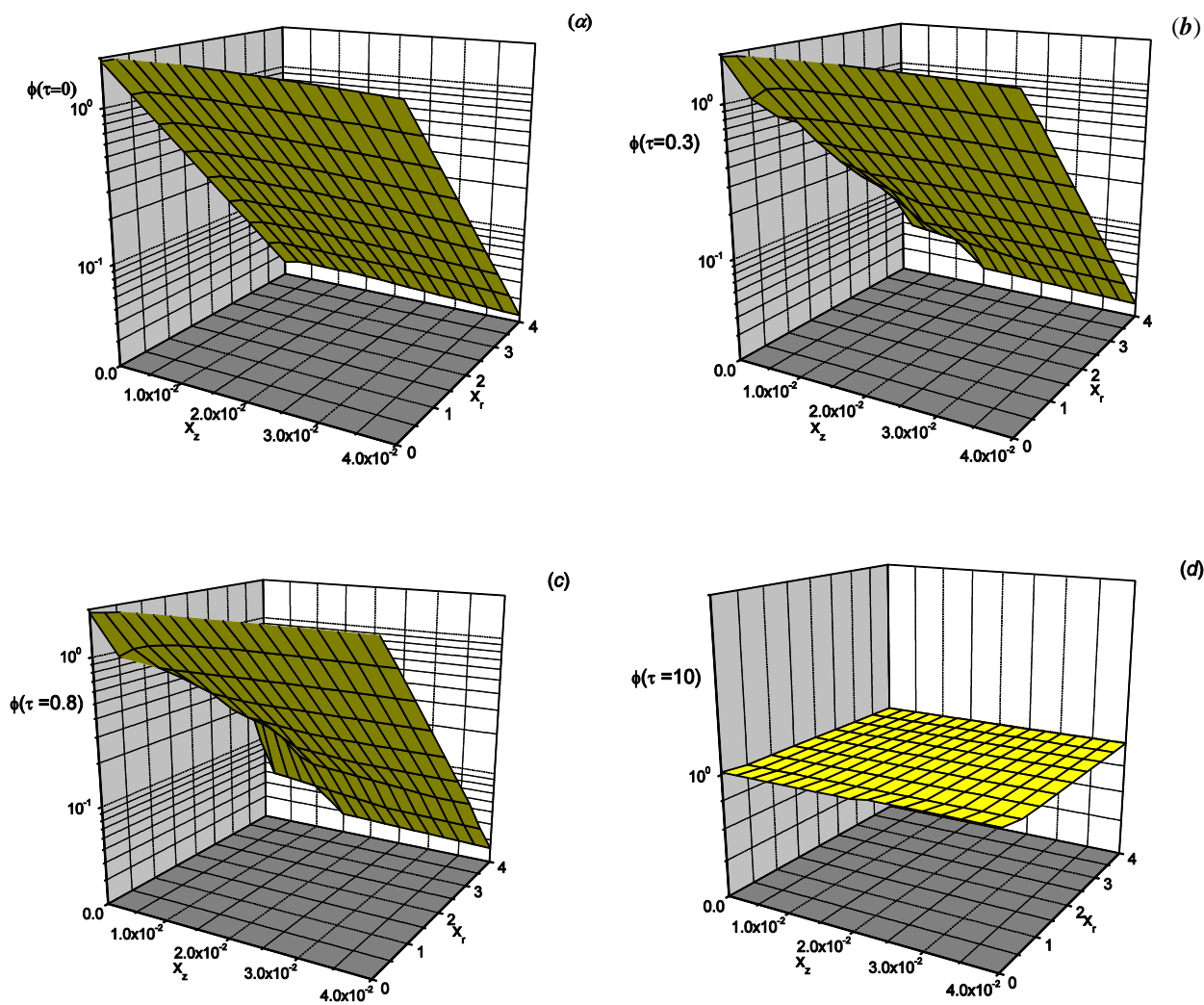


Рис. 7. Функция $\Phi(x_r, x_z; \tau) = f(x_r, x_z; \tau) / f^{(0)}$, $f^{(0)} \equiv f(x_r, x_z; \infty)$, в различные моменты времени τ , ($\tau \equiv t/\tau_L$) для случая $\varepsilon = 33$. $\tau = 0$ (a); 0.3 (b); 0.8 (c) и 10 (d).

(Изображена область вблизи точки $x_r = x_z = 0$. Необходимую точность обеспечивали следующие размеры области расчета: $0 \leq x_r \leq 8$, $0 < x_z \leq 8$.)

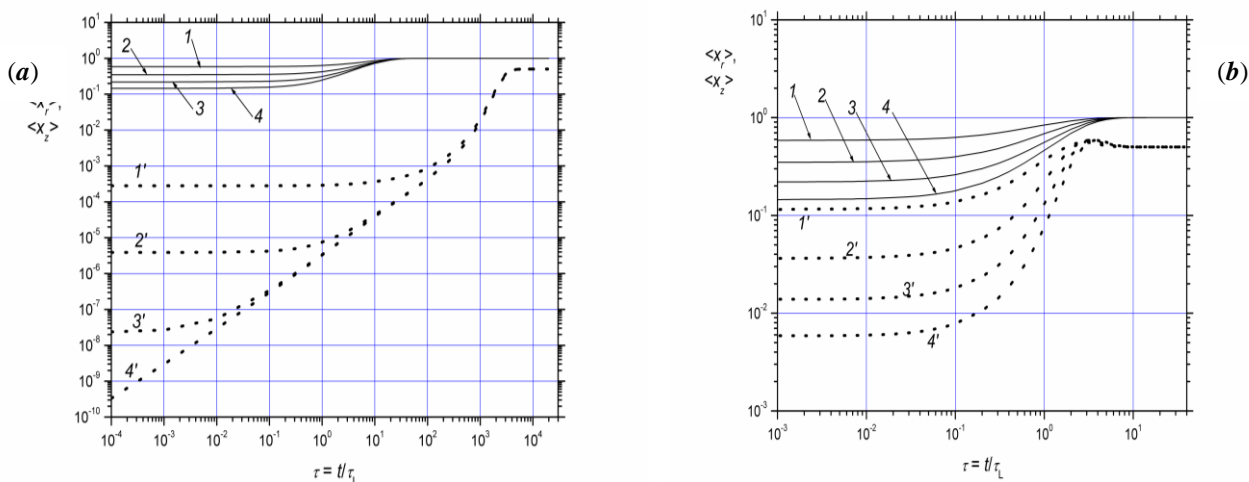


Рис. 8. Зависимости $\langle x_r \rangle$ кривые 1–4, и $\langle x_z \rangle$ кривые 1'–4', для случаев $\varepsilon = 0.03$ (a) – газ Релея, и $\varepsilon = 33$ (b) – газ Лоренца. Начальные условия отвечают значениям числа Маха $M_1 = 2$ (кривые 1, 1'); 3 (кривые 2, 2'), 4 (кривые 3, 3') и 5 (кривые 4, 4')

Приложение (Динамика столкновений. Расчет тензора $\mathbf{B}(\vec{c})$)

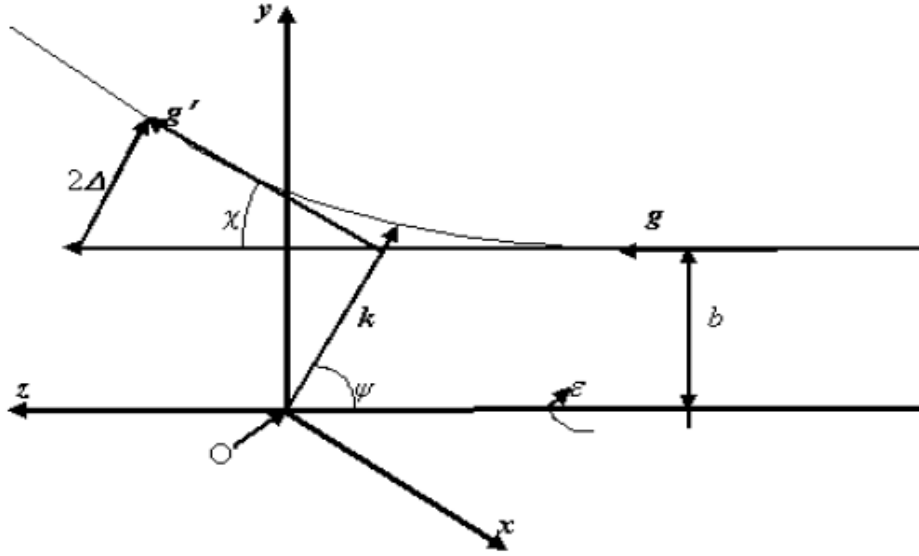


Рис. 1П. Геометрия двухчастичного столкновения (подробнее см. [8, 9]). Точка О – центр масс. Относительная скорость сталкивающихся частиц примеси и термостата (индекс 2) $\vec{g} = \vec{c}_2 - \vec{c}$; $|\vec{g}| = |\vec{g}'| = g$. Изменение скорости частицы примеси в результате столкновения $\vec{\Delta} = \vec{c}' - \vec{c}$, $\vec{\Delta} = \Delta \cdot \vec{k}$, $\Delta = 2[m/(M+m)]g \cos \psi$, χ – угол отклонения (угол между начальным и конечным векторами относительной скорости). $k \cdot d\vec{k} = gb db d\varepsilon$, $d\vec{k} = \sin \psi d\psi d\varepsilon$, b – прицельный параметр

В рамках модели гладких жестких упругих сфер имеем (см. [9]):

$$b = \sigma_{12} \cos \frac{\chi}{2}, \quad \sigma_{12} = \frac{d_1 + d_2}{2}, \quad k \equiv k_{12} = g \sigma_{12}^2 \cos \psi.$$

В системе координат центра масс (ось z параллельна \vec{g}):

$$\vec{\Delta} = (\Delta_x, \Delta_y, \Delta_z), \quad \Delta_x = \Delta \sin \psi \cos \varepsilon, \quad \Delta_y = \Delta \sin \psi \sin \varepsilon, \quad \Delta_z = \Delta \cos \psi; \quad (1\Pi)$$

и

$$B_{ik}(\vec{c}) = \iint \left\{ \frac{\Delta_i \Delta_k}{2} \right\} f_2^{(0)}(c_2) g \sigma_{12} \cos \psi \sin \psi d\psi d\varepsilon dc_2, \quad \left\{ \frac{\Delta_i \Delta_k}{2} \right\} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \Delta_x^2 & \Delta_x \Delta_y & \Delta_x \Delta_z \\ \Delta_y \Delta_x & \Delta_y^2 & \Delta_y \Delta_z \\ \Delta_z \Delta_x & \Delta_z \Delta_y & \Delta_z^2 \end{pmatrix},$$

$$0 \leq \psi \leq \pi/2, \quad 0 \leq \varepsilon \leq 2\pi.$$

После подстановки (1\Pi) и интегрирования по ε и ψ получим

$$\mathbf{B}(\vec{c}) = a \int \widehat{\mathbf{G}} g^3 f_2^{(0)}(\vec{c}_2) d\vec{c}_2, \quad g = |\vec{c} - \vec{c}_2|.$$

Здесь

$$a = \frac{\pi}{6} \left(\frac{m}{M+m} \right)^2 \sigma_{12}^2 = \text{const},$$

$$\widehat{\mathbf{G}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix} = \widehat{\mathbf{I}} + \widehat{\mathbf{J}} \cdot \widehat{\mathbf{J}}, \quad \widehat{\mathbf{J}} = \sqrt{3} \cdot \widehat{\mathbf{I}}_z, \quad \widehat{\mathbf{I}}_z = \vec{g} / g;$$

\vec{I}_z - единичный вектор, направленный вдоль оси z (вдоль относительной скорости \mathbf{g}).

Таким образом, в произвольной системе координат \hat{G} - тензор с компонентами:

$$G_{ik} = \delta_{ik} + 3 \frac{g_i g_k}{g^2}, \quad i, k = x, y, z,$$

т.е.,

$$B_{ik}(\vec{c}) = a \int \left(\delta_{ik} + 3 \frac{g_i g_k}{g^2} \right) g^3 f_2^{(0)}(\vec{c}_2) d\vec{c}_2, \quad \vec{g} = \vec{c}_2 - \vec{c} \quad (2\Pi)$$

Для вычисления интегралов в (2\Pi) введем полярные координаты, приняв вектор \vec{c} в качестве оси z ; см. рис. 2\Pi.

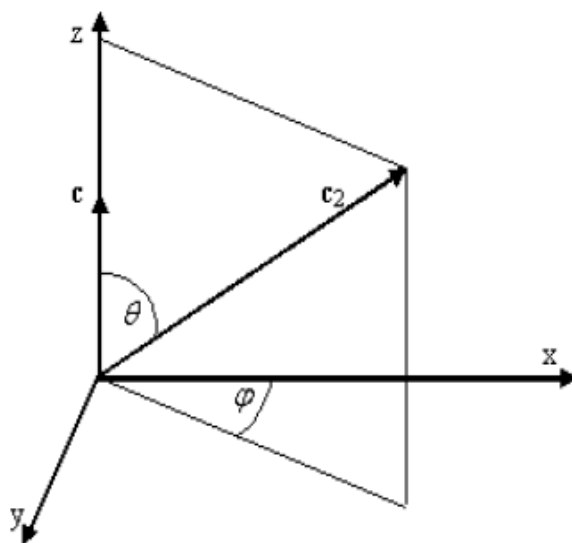


Рис. 2\Pi. Система координат для вычисления интегралов в (2\Pi)

В этих координатах

$$\vec{c} = (0, 0, c), \quad \vec{c}_2 = (c_2 \sin \theta \cos \varphi, c_2 \sin \theta \sin \varphi, c_2 \cos \theta), \quad d\vec{c}_2 = c_2^2 \sin \theta dc_2 d\theta d\varphi,$$

$$\vec{g} = \vec{c}_2 - \vec{c} = (c_2 \sin \theta \cos \varphi, c_2 \sin \theta \sin \varphi, c_2 \cos \theta - c).$$

После подстановки в (2\Pi) и интегрирования по φ от 0 до 2π получим:

$$B_{ik}(\vec{c}) = 2\pi a \{ \delta_{ik} \} \iint g^3 f_2^{(0)}(\vec{c}_2) c_2^2 \sin \theta d\theta dc_2 + \\ + 3\pi a \iint \begin{pmatrix} \sin^2 \theta & 0 & 0 \\ 0 & \sin^2 \theta & 0 \\ 0 & 0 & 2 \left(\cos \theta - \frac{c}{c_2} \right)^2 \end{pmatrix} f_2^{(0)}(\vec{c}_2) c_2^4 g \sin \theta d\theta dc_2. \quad (3\Pi)$$

Переменные θ и g связаны следующим соотношением:

$$g^2 = |\vec{c}_2 - \vec{c}|^2 = c^2 + c_2^2 - 2cc_2 \cos \theta \quad (4\Pi)$$

Для вычисления интегралов в (3П) заменяем переменную интегрирования θ на g ; при этом, ввиду (4П), $gdg = cc_2 \sin \theta d\theta$ и, следовательно, $g^3 \sin \theta d\theta = (cc_2)^{-1} g^4 dg$, а пределы интегрирования для g определяются соотношением: $|c - c_2| \leq g \leq c + c_2$.

После вычисления соответствующих интегралов по g и c_2 и после ряда простых, но громоздких преобразований получим:

$$\mathbf{V}(\bar{c}) = b[p(c)\hat{\mathbf{I}} + q(c)\bar{\mathbf{I}}_c \bar{\mathbf{I}}_c], \quad \hat{\mathbf{I}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \bar{\mathbf{I}}_c = \frac{\bar{c}}{c},$$

где компоненты тензора \mathbf{V} ,

$$V_{ik} = b \left[p(c)\delta_{ik} + q(c)\frac{c_i c_k}{c^2} \right],$$

определены выше выражениями (3).

Благодарности

Автор выражает глубокую благодарность В.М. Васильеву за помощь при компьютерной реализации численного расчета 2D – задачи.

Литература

1. Додулад О.И., Клосс Ю.Ю., Черемисин Ф.Г. Расчеты структуры ударной волны в смеси газов на основе решения уравнения Больцмана. // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2013. Т.14, вып.1. 17с. <http://chemphys.edu.ru/issues/2013-14-1/articles/211/>
2. Гордиец Б.Ф., Осипов А.И., Шелепин Л.А. Кинетические процессы в газах и молекулярные лазеры. Гл. 1. М.: Наука, 1980. 512 с.
3. Ландау Л.Д. Кинетическое уравнение в случае кулоновского взаимодействия (ЖЭТФ, 7, 203, 1937; Phys. Zs. Sowjet., 1936, 10, 154). Собрание трудов. Т. 1. / Под ред. Лифшица Е.М. М.: Наука. 1969. 512 с.
4. Andersen K., Shuler K.E. On the Relaxation of the Hard-Sphere Rayleigh and Lorentz Gas // J. Chem. Phys. 1964. V. 40. № 3. P. 633–650.
5. Сафарян М.Н., Ступоченко Е.В. Вращательная релаксация двухатомных молекул в легком инертном газе // ПМТФ. 1964. № 4. С. 29–34.
6. Сафарян М.Н. Об аппроксимации интегро-дифференциального уравнения уравнением фоккер-планковского типа // ПМТФ. 1977. № 5. С. 16–24.
7. Ferrari L. Diffusion coefficients of ions in lighter gases in an electric field // Chemical Physics. 1996. V. 206. P. 9–34.
8. Р. Балеску. Равновесная и неравновесная статистическая механика. Т. 2. Гл. 11. М.: Мир, 1978. 399 с.
9. Чепмен С. и Каулинг Т.Г. Математическая теория неоднородных газов. Гл. 4, 5. М.: ИЛ, 1960. 510 с.
10. Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики. М.: Наука, 1977. 736 с.
11. Лойцянский Л.Г. Механика жидкости и газа. М.: Наука, 1973. 847 с.

Статья поступила в редакцию 21 октября 2015 г.