

УДК 519.2 : 533.7 : 541.141.7

СТАТИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СОСТОЯНИЙ СМЕСИ ГАЗОВ С УЧЕТОМ ОБМЕНА ЭНЕРГИЕЙ МЕЖДУ ПОСТУПАТЕЛЬНЫМИ И ВНУТРЕННИМИ СТЕПЕНЯМИ СВОБОДЫ

Г. И. Змиевская, А. А. Пярнпуу, В. И. Шематович
(Москва)

1. Постановка задачи. В последнее время достигнут значительный прогресс в исследовании аналитическим путем и численными методами течений разреженного одноатомного газа [1, 2]. Все более пристальное внимание привлекают задачи, в которых, во-первых, нельзя ограничиться лишь простым газом, во-вторых, при столкновении частиц возможен обмен энергией между поступательными и внутренними степенями свободы, например возбуждение колебательных, вращательных и электронных уровней молекул, протекание реакций ионизации, диссоциации, рекомбинации и др. В [3] рассматриваются некоторые вопросы теории химически реагирующей смеси газов либо в условиях, близких к равновесным, либо в сильно неравновесных состояниях при наличии малого параметра. Имеются также попытки численного решения подобных задач [4—7].

Для решения задач кинетики многокомпонентной газовой смеси в однородном пространстве в [8, 9] был предложен численный метод статистического моделирования столкновений. В данной работе этот метод распространяется на смеси газов, в которых происходит обмен энергией между поступательными и внутренними степенями свободы частиц [10]. Развиваемый метод построен на базе модели одноатомного газа с упругими столкновениями [11, 12], асимптотическая эквивалентность которой уравнению Больцмана установлена в [13].

Строится нестационарная статистическая модель смеси газов с использованием основных понятий [10, 11] и алгоритма, моделирующего столкновительную релаксацию.

2. Построение модели. Пусть смесь газов состоит из M компонентов. Обозначим каждый компонент индексом a_l , где $l = 1, 2, \dots, M$, массу частицы a_l -го компонента через m_l , а скорость v^l .

Выделим в физическом пространстве некоторый объем V , в котором смесь газов заменим системой $N = N_1 + \dots + N_M = \sum_{l=1}^M N_l$ модельных частиц со скоростями $v_1^1, \dots, v_{N_1}^1; \dots; v_1^M, \dots, v_{N_M}^M$. Здесь N_l — число частиц компонента a_l . В целом состояние системы модельных частиц будет характеризоваться вектором

$$X = \{(v_1^1, \dots, v_{N_1}^1), \dots, (v_1^M, \dots, v_{N_M}^M)\} = \{v_1, \dots, v_N\}.$$

Введем статистическую модель смеси газов при помощи двух определений, первое из которых устанавливает понятие столкновения моделирующих частиц, а второе определяет интервал времени, разделяющий столкновения [12, 10].

Первое определение основывается на законах сохранения числа частиц, энергии и импульса при заданном потенциале взаимодействия, применение которых позволяет вычислить скорость после столкновения. По второму определению физические свойства моделирующих частиц задают вероятностные характеристики, описывающие модель, на основании которых получается экспоненциальное распределение времени ожидания очередного столкновения любой пары из N частиц

$$\mathcal{F}(\tau) = P\{\Delta t^* \leq \tau\} = 1 - \exp(-\lambda\tau),$$

где интервал τ не зависит от выбора начала отсчета времени; $\lambda =$

$= \sum_{1 \leq i < j \leq N} \omega_{ij}$ — частота столкновений; $\omega_{ij} = g_{ij} \sigma_{ij}(g_{ij})/V$ — вероятность столкновения пары частиц; $g_{ij} = |\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j|$; $\sigma_{ij}(g_{ij})$ — сечение столкновения; Δt^* — время ожидания. Следовательно, вероятность того, что в момент t столкнется пара частиц (i, j) при условии, что в этот момент состоялось столкновение одной из пар, равна $W_{ij} = \omega_{ij}/\lambda$.

При моделировании изменения внутренней энергии частиц при столкновении в качестве основных параметров удобно выбирать массу m_l , скорость \mathbf{v}^l и внутреннюю энергию $E_l = E_l(\Lambda_l)$ частиц, где Λ_l — набор квантовых чисел, определяющий частицы данного компонента (сорта). Переход частицы из сорта в сорт происходит при соблюдении законов сохранения полной энергии и импульса сталкивающихся частиц.

Следовательно, для скорости центра инерции \mathbf{G} и относительной скорости \mathbf{g} сталкивающихся частиц до и после столкновения при каждом столкновении выполняются соотношения

$$(2.1) \quad G^{ln} = G^{l'n'}, \quad g^{l'n'} = \left\{ \frac{m_{ln}}{m_{l'n'}} (g^{ln})^2 - \frac{2\Delta E_{ln}^{l'n'}}{m_{l'n'}} \right\}^{1/2},$$

где $m_{ln} = \frac{m_l m_n}{m_l + m_n}$ и $m_{l'n'} = \frac{m_{l'} m_{n'}}{m_{l'} + m_{n'}}$ — приведенные массы; $\Delta E_{ln}^{l'n'} = E_{l'} + E_{n'} - E_l - E_n$ — изменение внутренней энергии в рассматриваемом процессе; штрихи относятся к величинам после столкновения. Последний параметр определяет тип столкновения: $\Delta E_{ln}^{l'n'} = 0, l' = l, n' = n$ — упругое столкновение частиц; $\Delta E_{ln}^{l'n'} = 0, l' \neq l, n' \neq n$ — резонансное неупругое столкновение, которое характеризуется сохранением энергии внутренних степеней свободы и энергии поступательных степеней свободы в отдельности; $\Delta E_{ln}^{l'n'} > 0$ — нерезонансное неупругое столкновение, при котором происходит переход определенной доли кинетической энергии сталкивающихся частиц во внутреннюю энергию частиц; $\Delta E_{ln}^{l'n'} < 0$ — нерезонансное неупругое столкновение, при котором происходит переход части внутренней энергии частиц в кинетическую (если одна из частиц не обладает внутренней энергией, например электрон, то это будет случай так называемого сверхупругого столкновения).

В результате столкновений количество моделирующих частиц для каждого компонента будет переменным, но общее число частиц вследствие парности столкновений сохраняется. Полное сечение столкновения моделирующих частиц сортов a_l и a_n может быть задано в виде

$$(2.2) \quad \sigma_{ln}^T(g^{ln}) = \sigma_{ln}^{*T}(g^{ln}) + \sum_{l'n'} \sigma_{ln}^{l'n'}(g^{ln}),$$

где σ_{ln} — сечение упругого взаимодействия; $\sigma_{ln}^{l'n'}$ — сечение взаимодействия для процесса $a_l + a_n \rightarrow a_{l'} + a_{n'}$.

При расчете вероятностных характеристик W_{ij}^{ln} для этого процесса используется (2.2), следовательно,

$$(2.3) \quad \omega_{ij}^{ln} = (\omega_{ij}^{ln})^u + (\omega_{ij}^{ln})^n,$$

где величина $(\omega_{ij}^{ln})^u$ — вероятность упругого столкновения; $(\omega_{ij}^{ln})^n$ — вероятность неупругого столкновения частиц. Таким образом, времена ожидания очередного столкновения вычисляются через частоту столкновений λ с использованием формул (2.2), (2.3), содержащих информацию о неупругих процессах.

Численный алгоритм, соответствующий данной статистической модели смеси газов с физико-химическими процессами, базируется на приве-

денных выше положениях и учитывает изменение внутренней энергии частиц и изменение сорта частиц при столкновениях. Реализация алгоритма представляет собой численное решение аналоговым методом Монте-Карло по конечно-разностной схеме уравнения Колмогорова $\partial\varphi(\mathbf{X}, t)/\partial t = K\varphi(\mathbf{X}, t)$ для вероятностного распределения $\varphi(\mathbf{X}, t)$ состояния системы частиц $\mathbf{X}(t)$. При этом в произвольный момент времени t могут быть вычислены макроскопические характеристики компонентов смеси как математические ожидания соответствующих средних величин [10].

3. Система определяющих параметров. В численных экспериментах физические величины, характеризующие состояние смеси, представляются в безразмерном виде с определяющими параметрами: масса m , плотность n , температура T , некоторая эффективная длина α , зависящая от потенциала взаимодействия. Величины $\lambda \sim 1/\pi n d^2$ и $\bar{v} \sim \sqrt{kT/m}$ — средняя длина свободного пробега и средняя скорость — связывают параметры, определяющие физический эксперимент, с характеристиками математической модели: с константой статистического объема $V_0 \sim \lambda^3$, масштабом времени $\tau = \lambda/\bar{v}$ и числом моделирующих частиц $N \sim n$. В качестве базовых величин в расчетах выбираются определяющие параметры одного из компонентов (с условным номером $l = 1$), и обезразмеривание выполняется относительно этих величин и их комбинаций.

Выбор шага Δt по времени в алгоритме ограничен, с одной стороны, условием $\omega_{ij}^l \Delta t < 1$ и $\Delta t \ll 1$, при котором полное число столкновений S в системе моделирующих частиц определяется распределением Пуассона, с другой стороны, условием точности построения алгоритма реализующего марковскую цепь, соответствующую процессу $\mathbf{X}(t)$.

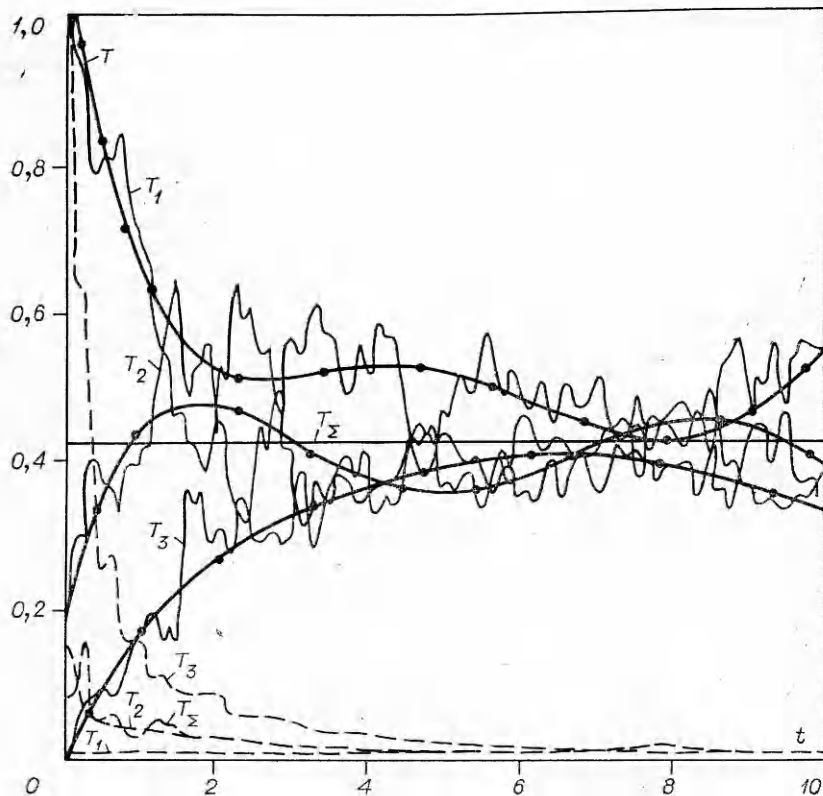
Как следует из [10, 12], нестационарная статистическая модель аппроксимирует уравнение Больцмана с точностью до величины $O(1/N)$, являющейся результатом замены реальной среды конечным числом моделирующих частиц, а конечно-разностная схема, к которой сводится алгоритм, условно устойчива и обеспечивает точность аппроксимации до $O(\Delta t)$ [11]. Предварительная оценка величины погрешности $O(1/N + \Delta t)$ обуславливает выбор суммарного числа частиц в эксперименте и шага по времени Δt алгоритма.

4. Релаксация по поступательным степеням свободы. В решении задачи релаксации поступательных степеней свободы при заданной начальной температурной неравновесности предполагается, что внутренние степени свободы частиц находятся в равновесии.

Исследовалась смесь, состоящая из трех газов ($M = 3$). Число моделирующих частиц каждого из компонентов выбирается пропорционально начальным плотностям.

Начальные значения скоростей каждой из моделирующих частиц задавались в соответствии с начальной функцией распределения, предполагаемой максвелловской с соответствующей температурой.

Были рассмотрены следующие задачи: релаксация двух компонентов газовой смеси в термостате, образованном третьим компонентом; релаксация смеси газов с одинаковыми физическими свойствами (одного газа при заданной начальной температурной неравновесности с определением времен релаксации и оценкой точности результата); исследование зависимости времен релаксации смеси газов от параметров модели: объема V и числа частиц N ; анализ эволюции функции распределения по скоростям начального состояния каждого из компонентов смеси в процессе столкновительной релаксации; сравнение результатов, полученных при помощи статистической модели, с результатами расчетов релаксации смеси двух газов другими конечно-разностными и статистическими методами.



Фиг. 1

При решении первой из перечисленных задач функция распределения частиц по скоростям одного из компонентов, так называемого термостата, поддерживается постоянной, к которой должны стремиться температуры релаксирующих компонентов смеси.

Результаты численного эксперимента для случая $T_1^c < T_2^0, T_3^0$; $T_1 = T_1^0 = \text{const}$ ($N = 30, \Delta t = 0,1$) приведены на фиг. 1 (штриховые линии), здесь же приведены температуры компонентов, которые сопоставляются с температурой смеси T_Σ , вычисленной по значениям T_1, T_2, T_3 , сплошными линиями с точками обозначены сглаженные по методу наименьших квадратов значения T_1, T_2, T_3 .

Точность расчета может быть повышена за счет увеличения числа частиц, участвующих в численном эксперименте, и уменьшения в алгоритме шага по времени, но для сохранения исходных физических характеристик газа необходимо сохранить величину параметра N/V как одного из параметров подобия.

Для оценки точности численные эксперименты выполнены при следующих параметрах численной модели: $T_1 : T_2 : T_3 = 1 : 0,01 : 0,001$; $n_1 = n_2 = n_3 = 1,0$; $m_1 = m_2 = m_3 = 1$; $d_1 = d_2 = d_3 = 1$ и

а) $\Delta t = 0,2, V = 5V_0, N_l = 5, l = 1, 2, 3$;

б) $\Delta t = 0,1, V = 10V_0, N_l = 10, l = 1, 2, 3$

с числом независимых реализаций L , равным 3.

Полученные данные подтверждают предварительные оценки точности статистической модели. Так, в расчетах для варианта «а» температуры компонентов определяются с отклонением δ_Σ от среднего значения тем-

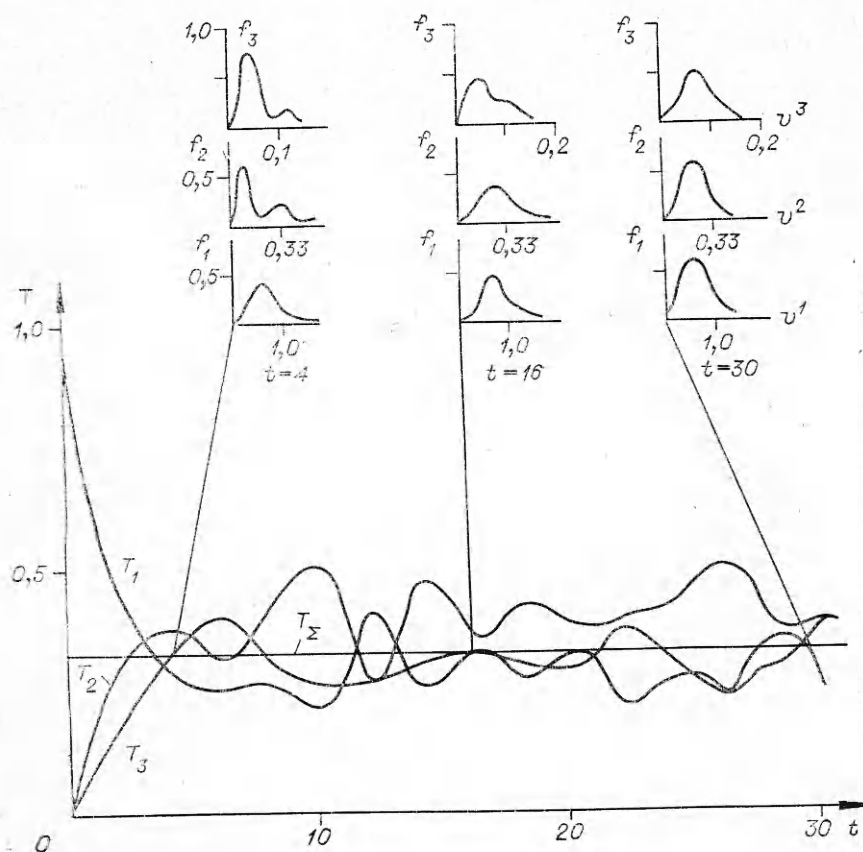
пературы смеси \bar{T}_Σ до 20%, в то время как предварительная оценка точности сверху дает 26%. Для случая «б» макропараметры определяются с точностью до 10% (предварительная оценка 13%).

Анализируя величину дисперсии макропараметров D_Σ по числу реализаций, можно сделать вывод, что величина ее незначительна уже для небольшого числа ($L = 3$) реализаций численного эксперимента и величина дисперсии не возрастает со временем, а наблюдаются незначительные в пределах точности определения величин флуктуации.

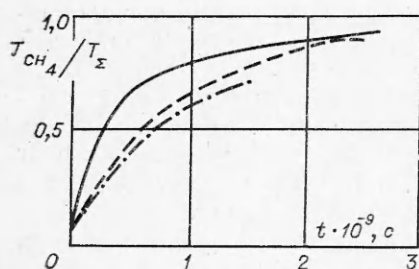
На фиг. 2 показаны изменение во времени температур компонентов смеси и эволюция функции распределения частиц по скоростям каждого из компонентов, имеющих отношение масс 1:10:100 и диаметров частиц 1:2:3, а остальные параметры совпадают со случаем «б». Здесь показано, как анализ функций распределения компонентов в процессе релаксации дает дополнительную информацию о ходе процесса.

На фиг. 3 отражена релаксация холодного компонента CH_4 в смеси метана и аргона к равновесной температуре.

В начальный момент предполагалось, что концентрации компонентов Ar и CH_4 были одинаковыми ($\sim 10^{18} \text{ см}^{-3}$), а температуры имели значения $T_{\text{Ar}} = 10^4 \text{ К}$, $T_{\text{CH}_4} = 3 \cdot 10^2 \text{ К}$. Моделирование [выполнялось при следующих значениях параметров: $T_1 : T_2 = 1 : 0,03$, $N_1 = N_2 = 10$, $V = 20V_0$, $\Delta t = 0,1$. Здесь же приведены результаты работы [14] (штрихо-



Ф и г. 2



Ф и г. 3

5. Релаксация возбужденных состояний. Задача релаксации возбужденных состояний рассматривается в рамках квазиклассического приближения, когда столкновения частиц, имеющих поступательные степени свободы, описываются классически, а спектр значений внутренней энергии частиц дискретен. Предполагается, что в процессе столкновений возможен обмен энергией между степенями свободы газа, за исключением резонансного неупругого обмена.

Рассмотрим смесь двух газов, один из которых состоит из бесструктурных частиц (например, электронов), а второй — из частиц, обладающих двумя уровнями внутренней энергии: основным и возбужденным. В статистической модели будем иметь три компонента, где один из них (для определенности — первый) является бесструктурным, а второй и третий компоненты состоят из частиц с одинаковыми массами, но различными внутренними энергиями (E_n и E_m соответственно, причем $\Delta E_n^m = E_m - E_n > 0$).

Основным процессом, определяющим поведение рассматриваемой системы частиц, является парное столкновение, время которого по сравнению с временем между столкновениями пренебрежимо мало. Время жизни возбужденного состояния полагается бесконечно большим, чем исключается возможность бесстолкновительного перехода частиц третьего компонента в основное состояние. Не рассматривается возможность ионизации и рекомбинации частиц смеси, а также здесь не моделируется излучение, которое может возникнуть при релаксации возбужденного состояния. Возможны столкновения только трех типов: упругие, неупругие и сверхупругие (столкновения второго рода).

В результате столкновений первого типа $\Delta E_n^n = 0$ и могут измениться лишь скорости v^l и v^n бесструктурной частицы и частицы в основном состоянии (внутренняя энергия $E_n = \text{const}$).

Столкновения второго типа происходят при выполнении условия $E = m_{ln}(g^{ln})^2/2 \geq E^*$, где $g^{ln} = |v^l - v^n|$ — относительная скорость сталкивающихся частиц; m_{ln} — приведенная масса частиц; E^* — пороговое значение энергии, определяющее данный неупругий процесс. При этом происходит образование частицы третьего компонента с внутренней энергией E_m и исчезновение частиц в основном состоянии. В соответствии с тем, что здесь рассматривается модель двух уровней внутренней энергии, доля кинетической энергии, передаваемой при столкновении из поступательных степеней свободы во внутренние, ограничена разностью энергий этих уровней — основного и возбужденного состояний. Для того чтобы передача энергии между степенями свободы была эффективной, необходимо выполнение условия неадиабатичности процесса передачи [15], которое в рассматриваемой модели смеси выполняется [8].

вая линия) и [6] (штрихпунктирная линия), выполненные при тех же начальных физических условиях. Такое сопоставление с результатами, полученными при решении системы уравнений Больцмана конечно-разностным методом [14] и методом Монте-Карло [6], показывает хорошую точность и эффективность используемой нами нестационарной статистической модели. Так, в [14] время счета $> \sim$ на порядок, а в [6] для обеспечения необходимой точности число частиц больше на 2—3 порядка.

В процессе столкновений третьего рассматриваемого типа имеем $\Delta E_m^n < 0$, и вследствие того, что знак величины ΔE_m^n является обратным знаку той же величины при втором типе столкновений, сверхупругие столкновения могут быть названы обратными по отношению к неупругим столкновениям.

Упругие столкновения характеризуются постоянным сечением рассеяния

$$\begin{cases} \sigma_{ik}(g^{ik}) = (\sigma_{ik})_0, \\ d\sigma_{ik} = \frac{1}{4\pi} \sigma_{ik}(g^{ik}) d\Omega, \end{cases} \quad i, k = l, n, m,$$

где $(\sigma_{ik})_0 \sim 10^{-15} - 10^{-16}$ см² совпадает с упругим сечением столкновения основных атмосферных компонентов.

В случае неупругих столкновений бесструктурных частиц с атомами в основном состоянии сечение процесса здесь аппроксимируется выражением

$$\begin{cases} \sigma_{ln}^{lm}(g^{ln}) = \begin{cases} 0, & g^{ln} < g_H^{ln}, \\ (\sigma_{ln}^H)_0 \left(1 - \left(\frac{g_H^{ln}}{g^{ln}}\right)^2\right), & g^{ln} \geq g_H^{ln}, \end{cases} \\ d\sigma_{ln}^{lm} = \frac{1}{4\pi} \sigma_{ln}^{lm}(g^{ln}) d\Omega, \end{cases}$$

где $g_H^{ln} = \{2\Delta E_n^m/m_{ln}\}^{1/2}$ — пороговое значение относительной скорости сталкивающихся частиц; величина $(\sigma_{ln}^H)_0 \sim 10^{-17} - 10^{-18}$ см² — среднее характерное значение неупругого сечения возбуждения атома электроном.

Сечение сверхупругого рассеяния может быть представлено в виде

$$\sigma_{lm}^{ln}(g^{lm}) = (\sigma_{lm}^c)_0 (1 - g^{lm2}/g_{as}^2), \quad d\sigma_{lm}^{ln} = \frac{1}{4\pi} \sigma_{lm}^{ln}(g^{lm}) d\Omega,$$

где для обеспечения совпадения с экспериментальными данными $(\sigma_{lm}^c)_0 \sim 10^{-17}$ см²; $g_{as} = 4 - 7$.

Таким образом, данная модель может позволить рассмотреть ряд физико-химических процессов в газе типа возбуждения атомов электронным ударом. Представляется возможным исследовать влияние внешнего воздействия на газ, выражающееся либо в установлении равновесия в газе, либо в поддержании неравновесных состояний. Определение характерных времен обмена энергией между степенями свободы газа может позволить оценить пределы применимости равновесных моделей для газов, в которых нельзя ограничиться столкновительной релаксацией по поступательным степеням свободы. Важными представляются возможность оценки в численном эксперименте эффективности передачи энергии от одних степеней свободы к другим и вычисление скоростей реализующихся в газе процессов.

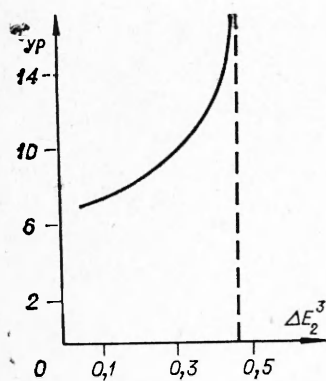
В частности, условием равновесия по внутренним степеням свободы является постоянство во времени значений температуры заселения уровней

$$T_{nm}^{уд} = -\Delta E_n^m / \ln \left(\frac{n_m}{n_n} \right),$$

а константы скоростей неупругих процессов определяются соотношениями

$$(K_{ln}^{l'n'})_{\sigma} = \frac{1}{n_l n_n} \int f_l(\mathbf{v}^l, t) f_n(\mathbf{v}^n, t) g^{ln} \sigma_{ln}^{l'n'}(g^{ln}, \theta) d\Omega d\mathbf{v}^l d\mathbf{v}^n,$$

где $f_l(\mathbf{v}^l, t)$ и $f_n(\mathbf{v}^n, t)$ — значения функций распределения частиц сортов a_l и a_n в заданный момент t .



Ф и г. 4

Рассмотрены следующие модельные задачи: оценка времени релаксации начального неравновесного заселенного возбужденного состояния в рассматриваемом газе; оценка эффективности передачи энергии из поступательных степеней свободы газа во внутренние в зависимости от энергии бесструктурных частиц и разности энергий основного и возбужденного состояний; заселение возбужденного уровня частиц газа путем подвода поступательной энергии в смесь, когда функция распределения бесструктурных частиц не изменяется; исследование процесса установления равновесия по поступательным степеням свободы газа при начальной температурной неравновесности компонентов газа при условии начального равновесного

заселения внутренних степеней свободы; анализ эволюции начальных функций распределения по скоростям в результате реализации неупругих процессов; оценка констант скоростей процессов возбуждения внутренних степеней свободы неупругими столкновениями частиц и релаксации возбужденного состояния при сверхупругих ударах.

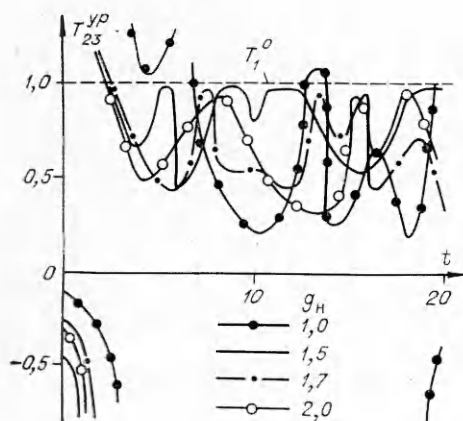
Неравновесное начальное состояние соответствует ситуации, когда в системе имеется неравновесность либо по поступательным степеням свободы (температурная неравновесность), либо по внутренним степеням свободы (нарушено распределение Больцмана по концентрациям частиц в основном и возбужденном состояниях).

Процессы с изменением внутренней энергии исследовались в случаях, когда функция распределения бесструктурного компонента задана в виде δ -функции или максвелловской и поддерживалась неизменной во времени (термостат) и когда рассматриваемая система частиц предполагалась энергетически изолированной.

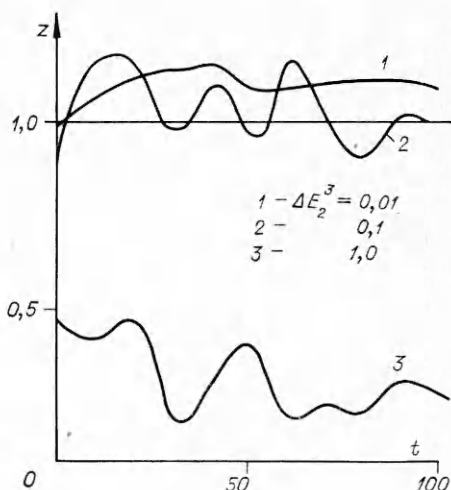
Процессы поступательной релаксации и изменения внутренней энергии характеризуются безразмерным параметром ΔE_2^3 , который в случае моноэнергетического начального распределения бесструктурных частиц есть отношение энергии возбуждения уровня при температуре уровня $T_{23}^{ур}$ либо к кинетической энергии одной частицы (термостат), либо к средней тепловой энергии, приходящейся на одну частицу. Характерными значениями этого параметра, при которых проводились численные эксперименты, являются 0,0625; 0,250; 0,3906; 0,490; 0,5625; 0,7225; 1,0; 1,562. Им соответствуют следующие значения пороговой скорости g_H : 0,5; 1,0; 1,25; 1,4; 1,5; 1,7; 2,0; 2,5.

На фиг. 4 приведена зависимость времени $\tau_{ур}$, за которое происходит инверсия заселенности возбужденного состояния ($T_{23}^{ур} < 0$) от величины ΔE_2^3 в случае термостата.

На фиг. 5 приведены результаты исследования возможности удержания инверсной заселенности возбужденного состояния; даны временные зависимости температуры заселенности возбужденного состояния при различных значениях параметра ΔE_2^3 . Установлена верхняя граница значений этого параметра $((\Delta E_2^3)_{\max} = 0,250)$ такая, что при $\Delta E_2^3 \leq (\Delta E_2^3)_{\max}$ в рассматриваемой системе частиц возможно поддержание инверсной заселенности возбужденного состояния. Далее, можно выделить спектр значений поступательной энергии бесструктурных частиц ($\Delta E_2^3 = 0,7225 - 1,5$), при котором система частиц приходит в состояние, ана-



Ф и г. 5



Ф и г. 6

логичное равновесному, т. е. $T_2, T_3 \approx T_1^0$ и $T_{23}^{yp} \approx T_1^0$, при этом часть поступательной энергии бесструктурных частиц уходит на возбуждение внутренних степеней свободы.

Для состояний системы частиц, когда поступательные степени свободы описываются максвелловским распределением с температурой T_Σ , константу скорости неупругого процесса можно вычислить аналитически:

$$(K_{12}^H)_\sigma^0 = \left(\frac{m_{12}}{2\pi T_\Sigma} \right)^{3/2} \int (g^{12})^3 \sigma_{12}^{13}(g^{12}) \exp \left(-\frac{m_{12}(g^{12})^2}{2T_\Sigma} \right) dg^{12}.$$

Используя предложенную выше модель сечения возбуждения частиц в основном состоянии бесструктурными частицами, получаем

$$(5.1) \quad (K_{12}^H)_\sigma^0 = (\sigma_{12}^{in})_0 \left(\frac{3T_\Sigma}{m_{12}^2} \right)^{1/2} \exp(-\Delta E_2^3/T_\Sigma).$$

В условиях, близких к равновесию, статистическая константа скорости процесса с изменением внутренней энергии должна быть близка к величине (5.1) и константы скоростей неупругого и сверхупругого процессов близки по величине.

Для начальных условий $m_1 : m_2 : m_3 = 1 : 10 : 10$ и $n_3 : n_2 = \exp(-\Delta E_2^3/\tilde{T}_\Sigma)$, где $\tilde{T}_\Sigma = T_1/3$, и значений параметра ΔE_2^3 в интервале 0,01—1,0 были вычислены величины $F^H = (K_{12}^H)_\sigma / (K_{12}^H)_\sigma^0$ и $F^C = (K_{13}^C)_\sigma / (K_{13}^C)_\sigma^0$. Полученные отношения $z = F^H/F^C$ для трех значений параметра ΔE_2^3 приведены на фиг. 6. Из анализа этих результатов следует, что время релаксации меньше для системы частиц с высокоэнергетическими бесструктурными частицами ($\Delta E_2^3 = 0,01 - 0,1$), а константы скоростей $(K_{12}^H)_\sigma \approx (K_{13}^C)_\sigma$ и $F^H, F^C \approx 1$. Если $\Delta E_2^3 \geq 1,0$, установление равновесия по внутренним степеням свободы затруднено, так как константа скорости сверхупругих столкновений значительно превышает константу скорости неупругих столкновений ($z \ll 1$ при $\Delta E_2^3 \geq 1,0$), т. е. рассматриваемых столкновительных процессов недостаточно для описания установления равновесных распределений. Возможно, что в этом случае необходим учет иных механизмов релаксации внутренних степеней свободы, например учет излучательных переходов.

Таким образом, исследование релаксации системы частиц по поступательным и внутренним степеням свободы при помощи констант скоростей процессов с изменением внутренней энергии подтверждает выводы о поведении системы, сделанные на основании анализа физических свойств газовой смеси, моделируемой данной системой частиц.

Основным результатом данной работы является распространение метода нестационарного статистического моделирования на смеси газов, в которых протекают физико-химические процессы. Построена модель, позволяющая рассматривать процессы обмена энергией между степенями свободы при парных столкновениях частиц с учетом известного дискретного спектра значений внутренней энергии частиц и единственного требования о конечности полного сечения столкновения.

Построен численный алгоритм, в результате реализации которого могут быть получены макроскопические характеристики смеси: плотность, температура, средняя макроскопическая скорость, полная энергия, теплоемкость каждого компонента смеси, а также частота столкновений, константы скоростей реакции и др.

Результаты расчетов в задаче исследования релаксации пространственно-однородного газа при реализации в смеси только упругих столкновений подтвердили основные физические предпосылки о релаксации смеси по поступательным степеням свободы, т. е. установление единой температуры смеси и установление максвелловской функции распределения по скоростям для частиц компонентов смеси.

Для смеси газов с внутренними степенями свободы исследован физико-химический процесс, аналогичный процессу возбуждения атомов электронным ударом. В численном эксперименте определен диапазон подводимой в смесь энергии, при котором достигается инверсная заселенность возбужденных состояний частиц. Оценена эффективность передачи энергии из поступательных степеней свободы во внутренние в зависимости от подводимой энергии и разности энергий основного и возбужденного состояний. Определены условия, при которых в смеси газов устанавливается максвелл-больцмановское распределение по скоростям и внутренним энергиям. Рассчитаны константы скоростей процессов возбуждения внутренних степеней свободы неупругими столкновениями частиц и процессов снятия возбуждения сверхупругими столкновениями как в состояниях, близких к равновесным, так и в сильно неравновесных состояниях.

Авторы выражают благодарность О. М. Белоцерковскому, М. Я. Марову и В. Е. Яницкому за внимание к работе и полезные обсуждения.

Поступила 19 I 1979

ЛИТЕРАТУРА

1. Коган М. Н. Некоторые вопросы молекулярной газодинамики.— В кн.: Труды IV Всес. конф. по динамике разреженного газа и молекулярной газодинамике. М., изд. ЦАГИ, 1977.
2. Белоцерковский О. М., Яницкий В. Е. Численные методы в динамике разреженного газа.— В кн.: Труды IV Всес. конф. по динамике разреженного газа и молекулярной газодинамике. М., изд. ЦАГИ, 1977.
3. Валландер С. В., Нагнибеда Е. А., Рыдалевская М. А. Некоторые вопросы кинетической теории химически реагирующей смеси газов. Л., изд. Ленингр. ун-та, 1977.
4. Алексеев Б. В. Расчет функции распределения в начальной стадии химических реакций.— ЖВМиМФ, 1970, т. 10, № 5.
5. Ларсен П., Боргнакке К. Статистическая модель столкновений с ограниченной энергией обмена.— Сб. пер. Механика, вып. 6, 1976.
6. Денисюк С. А., Малама Ю. Г., Полак Л. С., Резванов Р. А. Применение метода Монте-Карло для решения некоторых задач физической и химической кинетики.— ТВТ, 1967, т. 5, вып. 6.

7. Змпевская Г. И., Пярнпуу А. А. Об использовании кинетических уравнений в задачах моделирования верхней атмосферы.— В кн.: Математические модели ближнего космоса. Новосибирск, Наука, 1977.
8. Змпевская Г. И., Пярнпуу А. А. Численное моделирование физико-химических процессов в атмосферах планет. Препринт ИПМ АН СССР, № 36, 1978.
9. Змпевская Г. И., Пярнпуу А. А., Шематович В. И. Решение модельных релаксационных задач для разреженных газовых смесей статистическим методом частиц в ячейках. Препринт ИПМ АН СССР, № 35, 1978.
10. Змпевская Г. И., Пярнпуу А. А., Шематович В. И. Численное исследование состояний смеси разреженных газов с учетом обмена энергией между поступательными и внутренними степенями свободы. Препринт ИПМ АН СССР, № 106, 1978.
11. Белоцерковский О. М., Яницкий В. Е. Статистический метод частиц в ячейках для решения задач динамики разреженного газа. I, II.— ЖВМиМФ, 1975, т. 15, № 5, 6.
12. Яницкий В. Е. Применение некоторых статистических моделей для численного решения уравнения Больцмана. Дис. на соиск. учен. степени канд. физ.-мат. наук. М., ВЦ АН СССР, 1974.
Яницкий В. Е. Применение стохастического процесса Пуассона для расчета столкновительной релаксации неравновесного газа.— ЖВМиМФ, 1973, т. 13, № 2.
Яницкий В. Е. Статистическая модель течения идеального газа и некоторые ее особенности.— В кн.: Численные методы механики сплошной среды. Т. 6 (№ 4). Новосибирск, изд. ВЦ СО АН СССР, 1975.
13. Кац М. Вероятность и смежные вопросы в физике. М., Мир, 1965.
14. Рыков В. А., Чуканова Т. П. Решение кинетических уравнений Больцмана в случае релаксации смеси газов.— В кн.: Численные методы в теории разреженных газов. М., изд. ВЦ АН СССР, 1969.
15. Мессн Г., Мотт Н. Теория атомных столкновений. М., ИЛ, 1963.

УДК 533.6.011

ГАЗОДИНАМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ТЕЧЕНИЯ ИНВЕРСНОЙ СМЕСИ ГАЗОВ В РЕЗОНАТОРЕ

В. М. Кузнецов

(Москва)

Расчет течения инверсной смеси многоатомных газов в резонаторе с учетом всей совокупности газодинамических и оптических явлений является сложной и нерешенной задачей. Существует несколько простых одномерных моделей [1, 2], базирующихся, в частности, на приближении постоянного коэффициента усиления. В основу этих моделей положено условие стационарной генерации $2k^*d = -\ln r_1 r_2$ [3], где k^* — насыщенный коэффициент усиления; d — расстояние между зеркалами резонатора; r_1 и r_2 — коэффициенты отражения. Поскольку обычно на входе в резонатор ($x = 0$) коэффициент усиления активной среды $k_\infty \neq k^*$, возникает разрыв в значениях искомых переменных. Формально этот разрыв устраняется введением тонкой переходной области, в которой полагают переменным либо значение одного из коэффициентов отражения $r = r(x)$ [1], либо вводят некоторое соотношение для интенсивности излучения $I = I(x)$ [2], что обеспечивает переход от усиления k_∞ к k^* . Далее по потоку система уравнений релаксирующей смеси газов решается при условии $k(x) = k^*$. Очевидно, в выборе тех или иных «согласующих» соотношений имеется определенный произвол. Покажем, что в рамках рассматриваемой модели может быть получено аналитическое решение задачи. Заметим, что аналитические модели для газодинамических CO_2 -лазеров строились и ранее [4—6]. Эти модели достаточно хорошо описывают физику процессов, протекающих в резонаторе, и позволяют рассчитывать выходную мощность. В них, однако, не всегда рассматривается переходная область на входе в резонатор и не учитывается влияние излу-