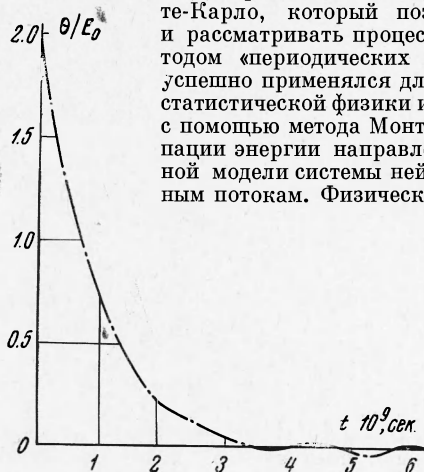


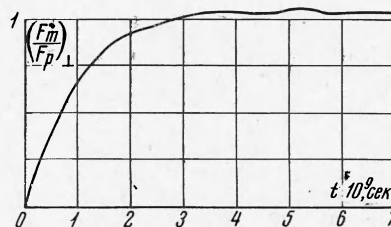
ИЗУЧЕНИЕ МАКСВЕЛЛИЗАЦИИ СИСТЕМЫ ДВУХ ВСТРЕЧНЫХ ПОТОКОВ ГАЗА МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

С. А. Денисик, С. Н. Лебедев, Ю. Г. Малама, Л. С. Полак,
Р. А. Резванов
(Москва)

Теоретическое изучение релаксационных процессов, протекающих за фронтом ударной волны в газах, представляет большой интерес с точки зрения физической кинетики и кинетики химических реакций. В частности, одним из основных процессов является процесс установления равновесия по поступательным степеням свободы молекул газа. При решении системы гидродинамических нелинейных уравнений, которые решаются только численно, могут быть получены лишь приближенные оценки макроскопических характеристик этого процесса и остается вне рассмотрения кинетика релаксации. Для решения этих задач весьма перспективным является метод Монте-Карло, который позволяет отказаться от решения уравнений и рассматривать процессы на молекулярном уровне. В сочетании с методом «периодических граничных условий» [1] метод Монте-Карло успешно применялся для решения равновесных и неравновесных задач статистической физики и физической кинетики [1,2]. В настоящей работе с помощью метода Монте-Карло рассмотрена кинетика процесса диссипации энергии направленного движения на пространственно-однородной модели системы нейтральных частиц, принадлежащих двум встречным потокам. Физическим примером такого рода задач может служить



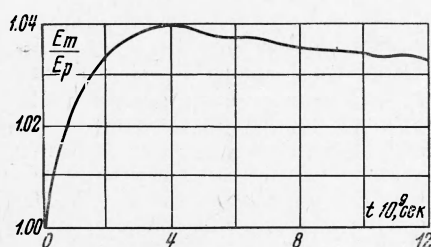
Фиг. 1



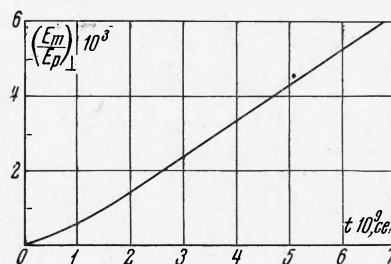
Фиг. 2

процесс «максвеллизации», протекающий за фронтом ударной волны.

Две группы частиц, по 54 в каждом потоке, образовывали замкнутую систему. Плотность частиц составляла 10^{18} см^{-3} . Каждый из потоков однороден по составу, а отношение масс частиц, принадлежащих разным потокам, ~ 2000 . Начальная кинетическая энергия каждой частицы соответствовала $3 \cdot 10^4 \text{ К}$.



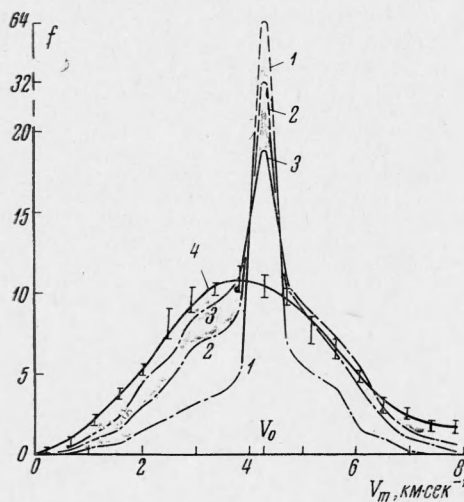
Фиг. 3



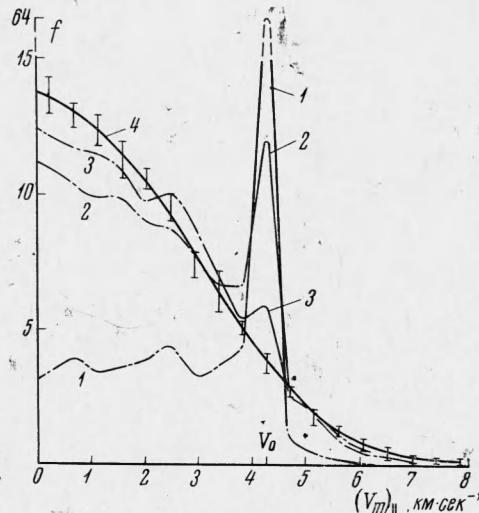
Фиг. 4

Введем лабораторную систему координат. Пусть $V_{\parallel} = V_z$ и $V_{\perp} = \sqrt{V_x^2 + V_y^2}$ соответственно продольная и поперечная компоненты скорости. В начальный момент времени все частицы обладали только продольными компонентами скорости. Величины $T_{\parallel} = mV_{\parallel}^2$ и $T_{\perp} = \frac{1}{2}mV_{\perp}^2$ условно назовем «продольной» и «поперечной» компонентами температуры. Столкновения частиц предполагались абсолютно упругими, а сами частицы — твердыми невзаимодействующими шарами. Координаты частиц в схему расчета не были включены [2]; рассматривалась кинетика диффузии в пространстве скоростей при рассеянии быстрых легких частиц на медленных тяжелых. Известно,

что такой процесс характеризуется тремя временами релаксации по поступательным степеням свободы. В данной работе решение прерывалось нами при установлении максвелловского распределения внутри группы легких частиц. Схема расчета основана на алгоритме решения задачи о максвеллизации неравновесной смеси двух газов, начальные температуры которых различны [2]. Практическое решение сводится к реализации на ЭВМ марковской цепи с отличными от нуля вероятностями переходов. Результаты расчета одной цепи носят вероятностный характер и зависят от выбора начального псевдослучайного числа.



Фиг. 5



Фиг. 6

В исследовании такого рода существенное значение имеют результаты, относящиеся к деталям получаемых функций распределения. Поэтому они должны быть получены с достаточно высокой точностью, которая не обеспечивается однократным расчетом цепи с использованием 54 частиц одного сорта. Поэтому для повышения точности до единиц процентов каждый отдельный вариант (цепь) повторялся статистически независимо ~ 60 раз с последующим усреднением результатов в определенные моменты. Этот прием эквивалентен увеличению эффективного числа частиц приблизительно на 1.5 порядка и позволяет повысить точность расчетов без значительного увеличения времени счета на ЭВМ. В результате достигнутая нами точность характеризуется статистической ошибкой $\leq \pm 2\%$. Ввиду этого, все аномалии в функциях распределения и в их поведении в зависимости от времени, выходящие за пределы указанной ошибки, естественно, трактуются нами как выражающие физическое поведение системы. Результаты расчетов приведены на фиг. 1—7.

Величина разности компонент температуры $\theta = T_{\parallel} - T_{\perp}$ может служить мерой отклонения системы от равновесия. В равновесной системе эта разность должна быть близка к нулю. На фиг. 1 представлена зависимость $\theta = \theta(t)$ от времени; здесь $T_{\parallel}$ и $T_{\perp}$ относятся к группе легких частиц. (E_0 — начальная энергия частиц). Кривая пересекает ось абсцисс в момент $3.5 \cdot 10^{-9}$ сек (~ 4.2 столкновения на одну частицу) и дальше слабо колеблется около нулевого значения, что указывает на относительную устойчивость равновесия в группе легких частиц. Полученное из решения равновесное значение средней поперечной компоненты энергии легкой частицы $(E_m)_{\perp}$ примерно на 4.5% больше соответствующей компоненты термодинамически равновесной энергии $(E_p)_{\perp}$. Изменение во времени отношения этих компонент показано на фиг. 2.

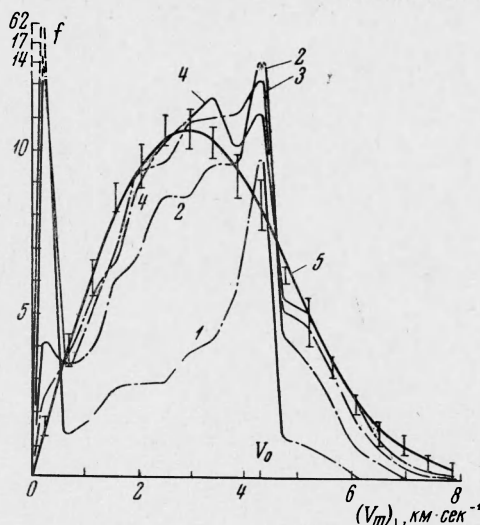
На фиг. 3 представлено изменение во времени средней полной энергии легких частиц. Увеличение средней энергии легких частиц в начальные моменты времени объясняется преобладанием столкновений между легкими и тяжелыми частицами. Это приводит к передаче энергии от тяжелых к легким частицам, поскольку начальные импульсы тяжелых частиц значительно больше импульсов легких частиц. Рост энергии легких частиц прекращается к моменту $4 \cdot 10^{-9}$ сек (~ 5.0 столкновений на частицу) и в последующие моменты времени начинается постепенное уменьшение E_m . К моменту установления полного равновесия в системе средние энергии легких и тяжелых частиц должны быть одинаковыми. Отметим, что аналогичная ситуация возникает в задачах о взаимодействии пучка заряженных частиц с плазмой [3]. Обмен энергией между пучком и плазмой прекращается в общем случае не при равенстве температур обеих компонент.

Естественно, что такое равновесие не является полным. На фиг. 4 показано изменение средней поперечной компоненты энергии тяжелых частиц $(E_M)_\perp$ со временем. Энергия монотонно увеличивается со временем и к моменту установления равновесия внутри группы легких частиц значение $(E_M)_\perp$ составляет доли процента от равновесного значения энергии $(E_p)_\perp$.

На фиг. 5 приведены функции распределения легких частиц по модулям скоростей. Параметром служит шаг по времени $\Delta t = 0.476 \cdot 10^{-9}$ сек, кривые 1, 2, 3 соответствуют значениям $t = 2\Delta t$, $4\Delta t$ и $6\Delta t$. Вертикальные черточки — среднеквадратичное отклонение функций от равновесной функции распределения. Всего было получено 15 функций. Из них на фиг. 5 представлены лишь характерные, поясняющие общую тенденцию в изменении вида функций распределения. В начальные моменты времени (до $3.5 \div 4 \cdot 10^{-9}$ сек) функции имеют абсолютный максимум в точке $V_0 = 4.27$ км/сек⁻¹ (начальная скорость). При приближении к равновесию величина пика на кривых уменьшается. Одновременно увеличивается дисперсия функций распределения. Начиная с $4 \cdot 10^{-9}$ сек (~ 5.0 столкновений на одну частицу) наблюдаются колебания около равновесной функции распределения. Существенно, что эти колебания заведомо не укладываются в статистическую ошибку расчета. В каждый фиксированный момент времени распределения значительно отличаются от равновесного, однако среднее по совокупности функций за время $\sim 4 \cdot 10^{-9}$ сек (~ 5.0 столкновений на одну частицу) представляет собой максвелловскую функцию распределения по скоростям, выделенную на фиг. 5 жирной линией. «Время жизни» отдельных флуктуационных максимумов и минимумов не превышает $0.5 \div 1.0 \cdot 10^{-9}$ сек ($0.55-1.10$ столкновений на частицу). Аналогичное поведение наблюдается и у функций распределения легких частиц по продольным (фиг. 6) и поперечным (фиг. 7) компонентам скоростей. Кривые 1, 2, 3 на фиг. 6 соответствуют значениям $t = \Delta t, 4\Delta t$ и $6\Delta t$, а кривые 1, 2, 3 и 4 — фиг. 7 — значениям $t = \Delta t, 3\Delta t, 5\Delta t$ и $6\Delta t$. Жирными линиями выделены равновесные функции. Интересной особенностью кривых на фиг. 7 является появление относительных максимумов функций распределения в точке $(V_M)_\perp = V_0 = 4.27$ км/сек⁻¹.

Это объясняется тем, что вероятность рассеяния частицы при упругом соударении в элемент телесного угла определяется выражением $d(\cos \theta) d\varphi$. Поэтому вероятность рассеяния частицы на угол θ в плоскости рассеяния определяется величиной $\sin \theta$ и, следовательно, максимальна для угла $1/2 \pi$. Это приводит при столкновениях в начальные моменты времени к повороту вектора скорости легкой частицы на $1/2 \pi$.

Рассмотрена кинетика процесса релаксации системы частиц с начальными направленными скоростями к максвелловскому равновесию внутри группы легких частиц. Равновесие носит относительно устойчивый характер. К моменту установления максвелловского распределения для легких частиц их средняя энергия выше энергии тяжелых. Показано, что функции распределения частиц по скоростям при достижении равновесия по $T_\parallel$ и $T_\perp$ в каждый фиксированный момент времени отличаются от максвелловских; равновесной является среднее по времени от совокупности функций распределения при усреднении за не слишком большой промежуток времени (порядка $4 \cdot 10^{-9}$ сек). Получены характеристические времена процесса релаксации и числа столкновений на частицу.



Фиг. 7

ЛИТЕРАТУРА

Поступила 13 III 1967

1. Фишер И. З. Статистическая теория жидкостей. Физматгиз, 1961.
2. Денисик С. А., Малама Ю. Г., Полак Л. С., Резванов Р. А. Исследование процесса максвеллизации неравновесной смеси аргона и метана методом Монте-Карло. Кинетика и термодинамика химических реакций в низкотемпературной плазме (сб. статей под ред. проф. Л. С. Полака). «Наука», 1965.
3. Трубинов Б. А. Столкновения частиц в полностью ионизованной плазме. Вопросы теории плазмы, вып. 1, Госатомиздат, 1963.