УДК 533.6.011

DOI: 10.18384/2310-7251-2020-4-86-94

АСИМПТОТИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ ДЛЯ ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПАР МОЛЕКУЛ В УДАРНОЙ ВОЛНЕ

Демидов И. В., Кузнецов М. М., Кузьмин М. К., Кулешова Ю. Д.

Московский государственный областной университет

141014, Московская область, г. Мытищи, ул. Веры Волошиной, д. 24, Российская Федерация

Аннотация

Цель: получение асимптотически строгих выражений для функций распределения пар молекул внутри фронта ударной волны.

Процедура и методы. В работе использовались асимптотические методы теоретической физики, основанные на выделении малых параметров.

Результаты. Получено асимптотически точное выражение для функции распределения пар молекул тяжёлого компонента ударно сжатой бинарной смеси газов в начале его поступательной релаксации.

Теоретическая и практическая значимость. Этот результат чрезвычайно важен для экспериментального моделирования эффекта высокоскоростного перехлёста в ударных трубах.

Ключевые слова: кинетическое уравнение, неравновесный, смесь газов, ударная волна.

Благодарности. Работа выполнена в рамках гранта РФФИ 20-07-00740 А. Исследование выполнено в рамках гранта Президента РФ для молодых учёных – кандидатов наук МК-1330.2020.9.

ASYMPTOTIC APPROXIMATION FOR THE DISTRIBUTION OF PAIRS OF MOLECULES IN A SHOCK WAVE

I. Demidov, M. Kuznetsov, M. Kuzmin, Ju. Kuleshova

Moscow Region State University

24 ulitsa Very Voloshinoi, Mytishchi 141014, Moscow Region, Russian Federation

Abstract

The aim of this work is to obtain asymptotically strict expressions for the distribution functions of pairs of molecules inside the front of a shock wave.

Methodology. The work makes use of asymptomatic methods of theoretical physics, based on the selection of small parameters.

Results. An asymptotically accurate expression is obtained for the distribution of pairs of heavy-component molecules of a binary shock of a compressed mixture of gases at the beginning of its progressive relaxation.

Research implications. This result is extremely significant for experimental simulation of a high-speed impact effect in shock tubes.

Keywords: kinetic equation, nonequilibrium, gas mixture, shock wave.

Acknowledgments. This work was supported by the Russian Science Foundation, (Grant No. 20-07-00740A) and the RF President's Grants Council (Support to Young Candidates of Sciences Program, Grant No. MK-1330.2020.9).

Введение

Ранее в предыдущих работах авторов [1–4] по аналитическому исследованию эффекта перехлёста в ударных волнах был получен ряд существенных результатов, основанных на обычно используемых аналитических представлениях одночастичных функций по скоростям молекул в ударной волне. К ним, как известно, относятся аппроксимации Тамма-Мотт-Смита, эллипсоидальное распределение Холвея по скоростям молекул и т. д. Суть же эффектов перехлёста, как известно, заключается в превышении значений какого-либо макроскопического параметра или значений функции распределения пар молекул внутри фронта ударной волны над соответствующими значениями за ним. В последнем случае этот вид перехлёста для функции распределения пар молекул называется также высокоскоростной поступательной неравновесностью [5]. Основное внимание было уделено получению общего вида аналитической зависимости функции распределения пар молекул от определяющих параметров как в простых (однокомпонентных), так и в бинарных смесях [2]. Этот оригинальный результат авторов позволил им выделить четыре основных физических фактора, управляющих механизмом эффектов перехлёста внутри фронта ударной волны:

- эффективное снижение порога химических реакций внутри фронта ударной волны вследствие «пучкового» характера бимодальной функции распределения Тамма-Мотт-Смита;
- снижение скорости равновесных химических реакций в «горячей» зоне за фронтом ударной волны вследствие сильного разбавления «релеевского» газа преобладающим лёгким носителем;
- снижение скорости равновесных высокопороговых химических реакций в «горячей» зоне за фронтом ударной волны вследствие энергетических затрат на диссоциацию (снижение равновесной статистической температуры по сравнению с кинетической внутри фронта ударной волны);
- ускорение скоростей высокопороговых химических реакций вследствие анизотропии поля кинетических температур внутри ударной волны.

Для того, чтобы эффект перехлёста в величинах скоростей физико-химических процессов мог заметно повлиять и на течение за фронтом необходимо, как показали численные экспериментальные исследования, чтобы его величина составляла не менее 10^4 . Такой многопорядковый отрыв в величинах скоростей кинетических поступательно-неравновесных процессов ориентирует прежде всего на точный учёт порядков величин, а не коэффициентов порядка единицы.

Это обосновывает применение ранее использованных в работах авторов соответствующих априорных аналитических аппроксимаций.

Вместе с тем, при таких аналитических аппроксимациях упускается влияние сечения столкновения молекул на вид их функции распределения. В полном виде учёт этого пятого фактора, определяющего эффект перехлёста, требует точного решения кинетического уравнения Больцмана. В настоящее время такое решение для структуры ударной волны удалось получить только численными методами [6]. Получить аналогичное аналитическое решение внутри всего фронта ударной волны представляется намного более сложным. Однако, как показано в данной работе, его можно получить локально, в отдельных сечениях потока. Наряду с этим, в данной работе используется точное распределение продольной кинетической температуры для оценки эффекта перехлёста функции распределения пар молекул в простом газе.

Относительная величина эффекта перехлёста эллипсоидальной функции распределения пар молекул в ударной волне

Эллипсоидальная функция распределения по скоростям отдельных молекул обычно, как известно, используется для расчёта профилей макропараметров. Однако для аналитического расчёта ускорения скоростей активированных физико-химических процессов, то есть эффекта их перехлёста в ударной волне, знания одночастичной функции недостаточно. Для этой цели требуется функция распределения пар сталкивающихся молекул. Такая функция была получена ранее в работе авторов [2].

Эллипсоидальное распределение учитывает анизотропию поля кинетических температур внутри фронта ударной волны. Как правило, кинетическая температура в направлении движения потока выше, чем в направлении, ему перпендикулярном. Более того, эта температура выше не только «перпендикулярной» температуры, но и превышает в некоторой области величину равновесной температуры за фронтом волны. В этом выражается эффект перехлёста продольной температуры. Заметим, что эффект перехлёста продольной температуры является фундаментальным научным фактом. Данный эффект был обнаружен экспериментально [7] и получен строго теоретически на основе законов сохранения потоков массы и импульса в ударной волне [8]. Непосредственным следствием работы [8] является то, что любая новая теория, связанная с исследованием структуры фронта ударной волны, обязательно должна быть проверена на предмет совпадения с эталонной кривой для продольной температуры T_x .

В настоящей работе эталонная зависимость температуры T_x от переменной концентрации частиц (или переменной макроскорости потока газа) использовалась для расчета величины относительного перехлёста пар молекул.

Гиперзвуковое приближение, использованное в настоящей работе, соответствует, как известно, стремлению числа Маха свободного потока в бесконечность [9]. На основе предыдущих результатов авторов [2] можно показать, что

в гиперзвуковом приближении величина относительного эффекта перехлёста для функции распределения пар молекул $\tilde{G}_{neq}$ будет равна:

$$\tilde{G}_{neq} \sim \exp \left\{ (g/u)^2 \left[\left(\frac{1}{2} - \varepsilon \right)^2 / \varepsilon (1 - \varepsilon) \right] \right\}, \quad (1)$$

где $\tilde{G}_{neq} = G_{neq} / G_{eq}$, G_{neq} – поступательно-неравновесная, эллипсоидальная функция распределения пар молекул внутри фронта ударной волны, G_{eq} – равновесная функция распределения пар молекул за фронтом волны, g – модуль относительной скорости $\vec{g}$, u – величина скорости свободного потока перед фронтом волны, ε – отношение плотностей потока перед фронтом волны и за ним.

В табл. 1 приведена оценка величины эффекта перехлёста для эллипсоидальной функции распределения пар молекул в простом газе. Параметрами в этой таблице являются параметрически задаваемая абсолютная величина относительной скорости молекул g в величинах скорости потока u , набегающего на ударную волну. Значения величин g , равные $3u$ и $5u$ примерно соответствуют энергиям активации высокопороговых химических реакций, начиная со значений в несколько эВ. Параметр ε^{-1} соответствует предельному сжатию в бесконечно сильной ударной волне с числом Маха M , $M \rightarrow \infty$.

Таблица 1 / Table 1

Величина эффекта перехлёста $\tilde{G}_{neq}$ в простом газе / The overshoot effect value $\tilde{G}_{neq}$ in a simple gas.

$\frac{g}{\varepsilon}$	u	$3u$	$5u$
$\frac{1}{4}$	$10^{0,1}$	$10^{1,3}$	$10^{3,6}$
$\frac{1}{6}$	$10^{0,3}$	10^3	10^9
$\frac{1}{7}$	$10^{0,4}$	10^4	10^{10}

Источник: составлено авторами.

Из формулы (1) непосредственно видно, что эффект высокоскоростного перехлёста $\tilde{G}_{neq} > 1$ удовлетворяет принципу независимости свободного потока от числа Маха M . Следует подчеркнуть, что величина $\tilde{G}_{neq}$ является микроскопической характеристикой газа, поскольку зависит от модуля относительной скорости молекул g . Таким образом, принцип независимости от числа Маха мо-

жет выполняться не только для макрохарактеристик гиперзвукового потока за фронтом ударной волны.

Из формулы (1) следует также, что эффект перехлёста $\tilde{G}_{neq} > 1$ будет заведомо выполняться для значений параметра $\epsilon > \frac{1}{2}$. В простом газе с минимальным

числом степеней свободы, равным 3, величина ϵ будет равна $\frac{1}{4}$. Для газа с вра-

щательными степенями свободы, когда полное число степеней свободы становится равным 5 (линейная молекула) или 6 (нелинейная молекула) величина ϵ

будет соответственно равна $\frac{1}{6}$ и $\frac{1}{7}$. С дальнейшим увеличением внутренних

степеней свободы параметр ϵ будет ещё меньше. Таким образом, соотношение (1) всегда выполнимо.

Необходимо отметить также очень быстрый (экспоненциальный) рост величины эффекта перехлёста при относительно небольшом изменении параметра ϵ .

Оценка величины высокоскоростного перехлёста $\tilde{G}_{neq} > 1$

при асимптотически точном знании функции распределения пар молекул в сильно диспергированных ударно сжатых газовых смесях

Известно, что в сильно диспергированных газовых смесях газов, когда концентрация лёгкого компонента n_l значительно превосходит концентрацию тяжёлого компонента n_h , $n_l \gg n_h$, эффект высокоскоростного перехлёста значительно усиливается [5]. Если же рассмотреть рэлеевский газ, когда неравенство $n_l \gg n_h$ сопровождается другим неравенством $m_l \ll m_h$, то в задаче возникает сильное разделение по величине характерных времён релаксации (времён прихода к равновесию) лёгкого и тяжёлого компонентов. Ударная волна как бы раздваивается. Сначала приходит к равновесию лёгкий компонент, пройдя через ударную волну в своём газе. Потом же на временах значительно больших (в отношении m_h/m_l [10]) к равновесию приходит тяжёлый компонент.

Такая асимптотическая ситуация даёт дополнительные возможности для точного аналитического решения проблемы высокоскоростного перехлёста.

В связи с этим рассмотрим бинарную рэлеевскую смесь газов и проанализируем основные физические особенности процессов релаксации. Довольно ясно, что в рэлеевской смеси газов первым к состоянию термодинамического равновесия приходит лёгкий компонент. К этому моменту тяжёлый компонент пребывает ещё в замороженном состоянии, асимптотически совпадающем с локально равновесным («холодным») состоянием перед фронтом ударной волны.

Таким образом, появляется возможность аналитически составить функцию распределения пар из лёгких и тяжёлых молекул на основе асимптотически точных одночастичных функций распределений для лёгкого («горячий Максвеллиан») и тяжёлого («холодный Максвеллиан») компонентов рэлеевской смеси.

Подчеркнём радикальное отличие использования «холодных» и «горячих» Максвеллианов при составлении функции распределения пар молекул на основе метода Тамма-Мотт-Смита и рассматриваемом асимптотическом случае рэлеевской смеси газов. В первом случае «холодный» и «горячий» Максвеллианы берутся в совершенно различных, бесконечно удалённых друг от друга сечениях потока перед и за ударной волной. В случае же рэлеевской смеси эти Максвеллианы берутся в одном и том же сечении, характеризующем асимптотически конечный этап прихода лёгкого компонента смеси к термодинамическому равновесию за фронтом ударной волны в лёгком газе. При этом можно показать, что так называемая перекрёстная мода в Тамм–Мотт–Смитовской функции распределения пар молекул будет математически точно совпадать с функцией распределения пар молекул рэлеевской смеси газа в сечении прихода лёгкого компонента к равновесию.

Для ограниченного числа возбужденных внутренних степеней свободы максимум высокоскоростного перехлёста $\tilde{G}_{neq}^{(lh)} > 1$ может быть представлен в табл. 2.

Таблица 2 / Table 2

Величина “перехлёста” $\tilde{G}_{neq}^{(lh)}$ в начале зоны релаксации тяжёлого компонента / The value of “overshoot” $\tilde{G}_{neq}^{(lh)}$ at the beginning of the relaxation zone of the heavy component.

Газ	(A)	(A ₂), без учета колебательных степеней свободы молекулы	(A ₂), с учетом вращательных и колебательных степеней свободы молекулы	(A ₃) с учетом вращательных и колебательных степеней свободы молекулы
γ	5/3	7/5	9/7	7/6
ε	1/4	1/6	1/8	1/13
$\tilde{G}_{neq}^{(lh)}$	1,31	2.37	4,84	3628

Источник: составлено авторами.

Здесь символом A обозначен сорт молекул газов с различным количеством атомов. Так, символами (A), (A₂), (A₃) обозначены молекулы, соответственно, одноатомных, двухатомных и трёхатомных газов, $\tilde{G}_{neq}^{(lh)} = G_{neq}^{(lh)} / G_{eq}^{(lh)}$, $G_{neq}^{(lh)}$ – поступательно-неравновесная функция распределения пар молекул внутри фронта ударной волны, $G_{eq}^{(lh)}$ – равновесная функция распределения пар молекул за фронтом волны.

Из данных табл. 2 можно сделать вывод, аналогичный выводу из данных табл. 1, об очень быстром (экспоненциальном) возрастании функции $\tilde{G}_{neq}^{(lh)}$ с относительно небольшим изменением параметра ε.

Заключение

В работе использовано точное выражение для величины продольной кинетической температуры в ударной волне при вычислении эффекта высокоскоростного перехлёста в простом газе.

Асимптотически точные выражения одночастичных функций распределения компонентов рэлеевской смеси использованы для определения эффекта высокоскоростного перехлёста. Асимптотически точная величина этого эффекта получена к моменту завершения процесса релаксации лёгкого компонента.

Статья поступила в редакцию 21.12.2020 г.

ЛИТЕРАТУРА

1. Кузнецов М. М., Кулешова Ю. Д., Смотров Л. В. Эффект высокоскоростной поступательной неравновесности в бимодальной ударной волне // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-математика. 2012. № 2. С. 108–116.
2. Kuznetsov M. M., Kuleshova Yu. D. Increase in Rates of Kinetic Processes Inside the Bimodal Hypersonic Shock Wave // Heat Transfer Research. 2012. Vol. 43. Iss. 3. P. 228–236. DOI: 10.1615/HeatTransRes.v43.i3.30.
3. Кузнецов М. М., Смотров Л. В. Аналитические свойства эффекта высокоскоростной поступательной неравновесности // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-математика. 2013. № 3. С. 66–73.
4. Kuznetsov M. M., Kuleshova Ju. D., Reshetnikova Yu. G., Smotrova L. V. Analytical properties of nonequilibrium threshold in shock waves // Journal of Physics: Conference Series. 2018. Vol. 996: International Interdisciplinary Conference “Euler Readings MRSU 2017” (22–24 November 2017, Moscow Region State University (MRSU), Russian Federation). P. 012006. DOI: 10.1088/1742-6596/996/1/012006.
5. Генич А. П., Куликов С. В., Манелис Г. Б., Черешнев С. Л. Распределение молекулярных скоростей во фронте ударной волны в газовых смесях // Известия Академии наук СССР. Механика жидкости и газа. 1990. № 2. С. 144–150.
6. Додулад О. И., Клосс Ю. Ю., Черемисин Ф. Г. Расчёты структуры ударной волны в смеси газов на основе решения уравнения Больцмана // Физико-химическая кинетика в газовой динамике (электронное периодическое издание). 2013. Т. 14. № 1. URL: <http://chemphys.edu.ru/media/published/5.pdf> (дата обращения: 20.09.2020).
7. Muntz C. P., Harnett L. N. Molecular Velocity Distribution Function Measurements in a Normal Shock Wave // The physics of fluids. 1969. Vol. 12. P. 2027–2035. DOI: 10.1063/1.1692308.
8. Yen Sh.-M., Ng W. Shock-wave structure and intermolecular collisions laws // Journal of Fluid Mechanics. 1974. Vol. 65. Iss. 1. P. 127–144. DOI: 10.1017/S0022112074001297.
9. Хейз У. Д., Пробстин Р. Ф. Теория гиперзвуковых течений. М.: Изд-во Иностранной литературы, 1962, 607 с.
10. Осипов А. П. Релаксационные процессы в газах. Неравновесное распределение энергии по поступательным степеням свободы // Физика горения и взрыва. 1966. № 4. С. 42–61.

REFERENCES

1. Kuznetsov M. M., Kuleshova Yu. D., Smotrova L. V. [Effect of high-velocity translational nonequilibrium in a bimodal shock wave]. In: *Vestnik Moskovskogo gosudarstvennogo oblastnogo universiteta. Seriya: Fizika-matematika* [Bulletin of the Moscow Region State University. Series: Physics-Mathematics], 2012, no. 2, pp. 108–116.
2. Kuznetsov M. M., Kuleshova Yu. D. Increase in Rates of Kinetic Processes Inside the Bimodal Hypersonic Shock Wave. In: *Heat Transfer Research*, 2012, vol. 43, iss. 3, pp. 228–236. DOI: 10.1615/HeatTransRes.v43.i3.30.
3. Kuznetsov M. M., Smotrova L. V. [Analytical qualities of high-velocity translational nonequilibrium in a shock wave]. In: *Vestnik Moskovskogo gosudarstvennogo oblastnogo universiteta. Seriya: Fizika-matematika* [Bulletin of the Moscow Region State University. Series: Physics-Mathematics], 2013, no. 3, pp. 66–73.
4. Kuznetsov M. M., Kuleshova Yu. D., Reshetnikova Yu. G., Smotrova L. V. Analytical properties of nonequilibrium threshold in shock waves. In: *Journal of Physics: Conference Series*. 2018, vol. 996: International Interdisciplinary Conference “Euler Readings MRSU 2017” (22–24 November 2017, Moscow Region State University (MRSU), Russian Federation), pp. 012006. DOI: 10.1088/1742-6596/996/1/012006.
5. Genich A. P., Kulikov S. V., Manelis G. B., Chereshev S. L. [The distribution of molecular velocities in the shock wave front in gas mixtures]. In: *Izvestiya Akademii nauk SSSR. Mekhanika zhidkosti i gaza* [Fluid Dynamics], 1990, no. 2, pp. 144–150.
6. Dodulad O. I., Kloss Yu. Yu., Tseremissine F. G. [Computations of a shock wave structure in a gas mixture on the base of the Boltzmann equation]. In: *Fiziko-khimicheskaya kinetika v gazovoi dinamike (elektronnoe periodicheskoe izdanie)* [Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics (electronic periodical)], 2013, vol. 14, no. 1. Available at: <http://chemphys.edu.ru/media/published/5.pdf> (accessed: 20.09.2020).
7. Muntz C. P., Harnett L. N. Molecular Velocity Distribution Function Measurements in a Normal Shock Wave. In: *The physics of fluids*, 1969, vol. 12, pp. 2027–2035. DOI: 10.1063/1.1692308.
8. Yen Sh.-M., Ng W. Shock-wave structure and intermolecular collisions laws. In: *Journal of Fluid Mechanics*, 1974, vol. 65, iss. 1, pp. 127–144. DOI: 10.1017/S0022112074001297.
9. Hayes W. D., Probstein R. F. Hypersonic Flow Theory. New York, Acad. Press, 1959, 464 p.
10. Osipov A. P. [Relaxation processes in gases. Nonequilibrium translational energy distribution]. In: *Fizika goreniya i vzryva* [Combustion, Explosion and Shock Waves], 1966, no. 4, pp. 42–61.

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

Демидов Иван Владимирович – аспирант кафедры теоретической физики Московского государственного областного университета;
e-mail: iv.demidov1812@yandex.ru;

Кузнецов Михаил Михайлович – доктор физико-математических наук, профессор кафедры теоретической физики Московского государственного областного университета;
e-mail: kuznets-omn@yandex.ru;

Кузьмин Михаил Кузьмич – доктор физико-математических наук, профессор кафедры математического анализа Московского государственного областного университета;
e-mail: mk.kuzmin@mgou.ru;

Кулешова Юлия Дмитриевна – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры высшей алгебры, элементарной математики и методики преподавания математики Московского государственного областного университета;
e-mail: juliaybogdanova@mail.ru

INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

Ivan V. Demidov – postgraduate student, Department of Theoretical Physics, Moscow Region State University;
e-mail: iv.demidov1812@yandex.ru;

Mihail M. Kuznetsov – Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof., Department of Theoretical Physics, Moscow Region State University;
e-mail: kuznets-omn@yandex.ru;

Mihail K. Kuzmin – Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof., Department of Mathematical Analysis, Moscow Region State University;
e-mail: mk.kuzmin@mgou.ru;

Yuliya D. Kuleshova – Cand. Sci. (Phys.-Math.), Assoc. Prof., Department of Higher Algebra, Elementary Mathematics and Methods of Teaching Mathematics, Moscow Region State University;
e-mail: juliaybogdanova@mail.ru

ПРАВИЛЬНАЯ ССЫЛКА НА СТАТЬЮ

Асимптотическое приближение для функции распределения пар молекул в ударной волне / Демидов И. В., Кузнецов М. М., Кузьмин М. К., Кулешова Ю. Д. // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-Математика. 2020. №4. С. 86–94.

DOI: 10.18384/2310-7251-2020-4-86-94

FOR CITATION

Demidov I. V., Kuznetsov M. M., Kuzmin M. K., Kuleshova Ju. D. Asymptotic approximation for the distribution of pairs of molecules in the shock wave. In: *Bulletin of the Moscow Region State University. Series: Physics-Mathematics*, 2020, no. 4, pp. 86–94.

DOI: 10.18384/2310-7251-2020-4-86-94