

Санкт - Петербургский государственный университет

Розыков Бахадур

Выпускная квалификационная работа

**Исследование прямых скачков уплотнения, возникающих в
ионизованном одноатомном газе**

Уровень образования: магистратура

Направление 01.04.03 «Механика и математическое моделирование»
Основная образовательная программа СВ.5008.2017 «Механика и математическое
моделирование»
Профиль «Механика жидкости, газа и плазмы»

Научный руководитель:
Профессор, д.ф.-м.н., Рыдалевская М.А.
Рецензент: заведующая кафедрой СПбГАСУ,
к.ф.-м.н., Рябикова Т.В.

SAINT-PETERSBURG STATE UNIVERSITY

Rozykov Bahadur

Final qualifying work

Study of direct shock waves occurring in ionized monatomic gas

Level of education: master's degree

Field of education 01.04.03 «Mechanics and mathematical modeling»

Main educational program CB.5008.2017 «Mechanics and mathematical modeling»

Area of specialization «Fluid, gas and plasma mechanics»

Scientific supervisor:

Professor

D.Sc. (Physics and Mathematics), Maria Rydalevskaya

Reviewer: Head of the Department SPbGASU,

Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Tatiana Vladimirovna

Содержание

1	Введение	3
1.1	Актуальность исследуемой темы	3
1.2	Обзор литературы	3
1.3	Цели	4
1.4	Предварительные замечания	4
2	Основные понятия	5
2.1	Термодинамика.	5
2.2	Статистические свойства газа.	6
2.3	Внутренняя структура газа.	6
2.4	Газовая динамика.	7
2.5	Состояние газа.	8
3	Математическое описание модели	10
3.1	3 типа распределения.	10
3.2	Интегро–дифференциальное уравнение для ионизованного газа	11
3.3	Вывод и вид ФР	11
3.4	Метод статсумм.	16
3.5	Уравнения на ПСУ	18
4	Численное описание модели	22
4.1	Алгоритм действия	22
4.2	Численные результаты и их анализ	22
5	Заключение	33
6	Список литературы	34

Условные обозначения и сокращения

$f_{ci}(\vec{u}, \vec{r}, t)$ – функция распределения частиц по скоростям \vec{u} и сортам c на i -м энергетическом уровне

\vec{r} – радиус-вектор частицы

\vec{u} – скорость частицы

\vec{v} – массовая скорость газа

m_c – масса частицы сорта c

ε_{ci} – внутренняя энергия частицы сорта c на i -м энергетическом уровне

N – число сортов (номер химического элемента)

$D_i f_i$ – дифференциальный оператор в уравнении Больцмана

$J_i(f_i)$ – интегральный оператор в уравнении Больцмана

$I_{kl}^{ij}(\vec{u}', \vec{u}'_1, \vec{u}, \vec{u}_1)$ – сечение перехода частиц k и l со скоростями \vec{u}' и \vec{u}'_1 в частицы i и j со скоростями \vec{u} и \vec{u}_1 $\vec{g} = \vec{u} - \vec{u}_1$ – относительная скорость сталкивающихся частиц

$W_{ij}^{kl}(\vec{u}', \vec{u}'_1, \vec{u}, \vec{u}_1) = s_i s_j m_i^3 m_j^3 I_{kl}^{ij}$ – плотность вероятности парных взаимодействий

n, n_c, n_{ci} – концентрация полная, сорта c и сорта c на i -м энергетическом уровне

ρ – массовая плотность газа

$\vec{c} \doteq \vec{u} - \vec{v}$ – собственная скорость молекулы

U – полная внутренняя энергия единицы объема

E – полная собственная внутренняя энергия единицы объема

h – энтальпия единицы объема

T – температура газа

k_B – постоянная Больцмана

$\beta = k_B T$ – единица энергии

h – постоянная Планка

N_L – постоянная Лошмидта

c_v, c_p – теплоемкость единицы объема при постоянном объеме и давлении

$\kappa = c_p/c_v$ – показатель адиабаты

p – гидростатическое давление

Z^{tot}, Z^{tr}, Z^{int} – статистическая сумма полная, поступательных степеней свободы и внутренняя соответственно

s_{ci} – статистический вес

ψ – аддитивный инвариант столкновений

γ – интенсивный параметр, соответствующий экстенсивному параметру Ψ

θ – скорость распространения поверхности сильного разрыва

$\nabla \cdot \doteq \frac{\partial}{\partial \vec{r}}$ – знак набла (градиента)

ТД – термодинамика

КТ – кинетическая теория

ПСР – поверхность сильного разрыва

ПСУ – прямые скачки уплотнения

ФР – функция распределения

1 Введение

1.1 Актуальность исследуемой темы

Задачи, связанные со сверхзвуковым движением, где учитывается внутренняя кинетика, являются актуальной во многих областях науки и техники, включая аэродинамику, ракетную технику и космическую технологию. Они связаны с изучением движения газов при скоростях, превышающих скорость звука, и включает в себя проблемы поведения газа в условиях высоких температур и давлений, движения газовых потоков вокруг тел, а также взаимодействия газов с поверхностями. Решение таких задач необходимо для разработки эффективных технологий воздушно-космической техники и для создания более эффективных двигателей, что в свою очередь открывает новые возможности для исследования и освоения космоса.

Газовая среда около обтекаемого тела может иметь очень малую плотность и разогреваться до очень высокой температуры. В этих условиях нельзя пренебрегать влиянием сжимаемости газа, нужно учитывать возможность изменения его состава и физико-химических свойств. Как известно, при сравнительно низких плотностях и высоких температурах в газе происходят процессы диссоциации и ионизации.

1.2 Обзор литературы

Изучению ионизированных газов посвящено большое число работ [1–5]. Составной частью многих исследований в физике плазмы, физике верхней атмосферы и в некоторых областях высокоскоростной и высокотемпературной газодинамики являются задачи определения равновесного состава термически ионизированных газов. Обычно эти задачи решаются двумя способами. Один из них опирается на системы дифференциальных уравнений, описывающих изменение со временем концентраций атомов, ионов и электронов за счет столкновений этих частиц [6]. Равновесные концентрации компонентов ионизированной смеси соответствуют решению таких систем, когда время стремится к бесконечности. Второй способ, часто называемый термодинамическим, связан с решением систем алгебраических уравнений. Эти системы содержат условия сохранения массы и заряда, а также уравнения, обычно называемые соотношениями Саха. Такие соотношения можно считать некоторым аналогом уравнений закона действующих масс (УЗДМ) для процессов ионизации и нейтрализации [7].

В данной работе предлагается метод определения равновесного состава ионизированных газов, в котором используется статистическое описание газовых систем. Это представляет из себя одним из новшеств.

Отметим под конец, что с физических позиций ударно волновые процессы изучены и представлены в труде Я. Б. Зельдовича [25]. Но все таки наш подход немножко отличается от уже известных.

1.3 Цели

В данной работе будут исследоваться прямые скачки уплотнения (ПСУ), возникающих в ионизованном одноатомном газе. Вторым новшеством является обобщение уравнений на этих скачках, из которых с легкостью выводимы известные уравнения динамической совместности, приводимые в газовой динамике.

Считается, что рассматриваемая смесь (из атомов, ионов и электронов) получена в результате термической ионизации, а также по обе стороны от ПСУ установилось локальное равновесие в каждом бесконечно малом объеме газа.

Полагая газ как сплошную среду, состоящая из большого числа частиц, можно описать его методами равновесной статистической физики и молекулярной кинетики путем введения в рассмотрение равновесных функций распределения (ФР). Такой подход позволяет нам учесть как внутреннюю структуру не влезая в дебри квантово-механического описания, так и осредненную картину течения с возможностью количественно описать термодинамические параметры (концентрацию, или плотность, давление, температуру и т.д.). А для описания движения газа необходимо применять методы газовой динамики высоких скоростей. Такой подход, где учитывается сжимаемость газа, позволяет объяснить причину резкого, скачкообразного, изменения параметров течения.

1.4 Предварительные замечания

Для того, чтобы адекватно описать какую-либо модель, необходимо в начале изложить используемые определения терминов, которыми будут оперировать в дальнейшем. Это позволит избежать недопонимания и многозначности в понимании того или иного факта, вещи. Следующее, что надо отметить, так это то, что без должного математического аппарата сложно исследовать и анализировать изучаемую модель. Поэтому в работе большое внимание уделяется этим двум аспектам. Хотя можно было обойтись простыми и сухими выкладками формул (уравнений) и попытаться как-то за счет вычислительных результатов исследовать поставленную задачу. Но в наших (неявных) целях и интересах было то, чтобы построить цельную и стройную теорию, где каждое утверждение или соображение связаны друг с другом. По возможности в работе важные или спорные факты снабжены ссылками на источники, где эти проблемы изучены и разобраны более подробно.

В этой работе кроме чисто теоретических фактов приведены много графических иллюстраций, верифицированные на основе известных теоретических фактов. Отчасти потому и приведен длинный список литературы в конце работы, т.к. не все выкладки можно найти в том или ином учебнике, пособии или статье.

2 Основные понятия

2.1 Термодинамика.

В термодинамике (ТД) вводят так называемые функции состояния, под которыми понимают величины, не зависящие от предыстории системы и полностью определяемые ее состоянием в данный момент. Здесь мы неявно использовали слово ТД система - произвольно выбранная совокупность тел, веществ, находящихся во взаимодействии, которая мысленно или фактически выделяется из окружающей среды. Состояние системы стационарное, если все ТД параметры системы с течением времени не меняются.

Исходным объектом изучения является равновесное состояние, которое определяется нулевым началом ТД - изолированная система всегда приходит в состояние ТД равновесия и никогда самопроизвольно выйти из него не может. В дальнейшем будем рассматривать не произвольные равновесные процессы, а локально равновесные. Под этим понимается, что в каждом физически бесконечно малом объеме установилось ТД равновесие. Бесконечно малость представляет собой такой участок пространства, размеры которого малы по сравнению с характерным масштабом изменения макроскопических величин, но все же достаточно велики по сравнению с размерами частиц (так, чтобы число частиц в этом элементе объема было достаточным для статистического описания).

Следующим важным понятием является температура. Определение этой величины зависит от выбранного формализма или аксиоматики. Мы остановимся лишь на кинетическом толковании этого параметра. Хотя можно было ограничиться ТД и/или статистическим, где эта величина определяется через другие ТД параметры состояния. Итак, температура есть величина, характеризующая приходящуюся на одну степень свободы среднюю кинетическую энергию частиц макроскопической системы, находящейся в состоянии термодинамического равновесия.

Последним необходимым ТД параметром состояния является энтропия, которая вводится в математический инструментарий вторым началом ТД. Эта величина служит "мостиком" между двумя областями наук - термодинамики и физической статистики. Математически это утверждение выражается через формулу (уравнение) Больцмана-Планка, связывающая энтропию S идеального газа числом реальных микросостояний, соответствующих макросостоянию газа [8], т.е.

$$S = k_B \ln W. \quad (1)$$

Здесь под макросостоянием подразумевают состояние ТД системы, заданное и охарактеризованное с помощью макроскопических параметров (они характеризуют систему в целом), а под микросостоянием понимают состояние системы, определяемое одновременным заданием координат и импульсов всех составляющих систему частиц.

Обобщением этого уравнения и установления связи между ТД и кинетической теорией (КТ) является H -теорема Больцмана.

2.2 Статистические свойства газа.

Начнем теперь конструировать саму газовую систему. Считаем, что газ идеален в ТД смысле, т.е. большую часть времени частицы (элементы системы) движутся независимо друг от друга, вступая во взаимодействие лишь в процессе столкновений, продолжительностью которых можно пренебречь по сравнению со временем свободного (хаотического) движения частиц. Это означает, что потенциал взаимодействия частиц пренебрежимо мал по сравнению с единицей. В результате столкновения может измениться энергетическое состояние частиц и химический состав. Химическими компонентами в нашем случае являются атомы, ионы и электроны.

Одним из основных принципов статистической физики заключается в том, что равновесному макросостоянию отвечает наибольшее число микросостояний и оно осуществляется максимальным числом способов. Это равносильно тому, что равновесное состояние является статистически наиболее вероятным и обладает наибольшей энтропией [9 - 10].

Итак мы исследуем систему из огромного числа частиц, находящихся на различных энергетических уровнях. Для поведения системы, состоящей из большого числа частиц, характерны статистические закономерности. С помощью введения в рассмотрение вероятностных, или статистических, методов описания таких систем, мы можем перейти из феноменологического описания к количественной характеристике системы частиц.

Для этого введем в рассмотрение (одночастичную) функцию распределения (ФР), или математическое ожидание, частиц

$$f_c(\varepsilon_i, \vec{u}, \vec{r}, t) = f_i(\vec{u}, \vec{r}, t). \quad (2)$$

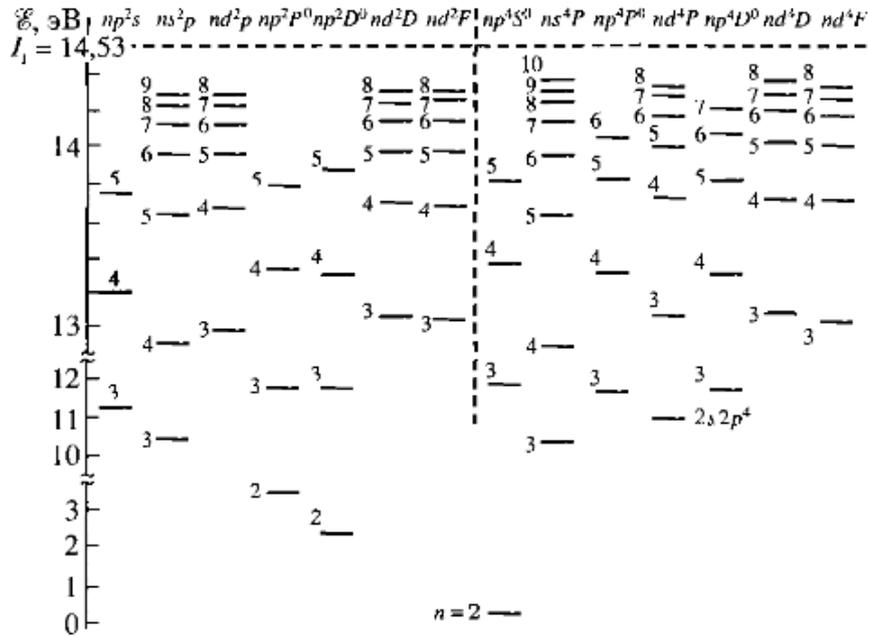
Здесь для упрощения записи использован единый индекс i , характеризующий как сорт частицы c , так и его внутреннее состояние ε_i .

2.3 Внутренняя структура газа.

В зависимости от характерного масштаба длины мы должны учесть структуру исследуемого объекта. Исследование на макроскопическом уровне системы влечет использование законов классической нерелятивистской физики Ньютона. Такому рассмотрению подвержены наши частицы без внутренней характеристики. Поэтому нужно еще учесть микроструктуру на малых длинах, где непрерывность энергии и определенность частицы теряет смысл. Такой подход называют квазиклассическим и полагают, что поступательные степени свободы описываются классически, а внутренние - квантовой механикой. Скажем несколько вводных слов о квантовом описании частиц.

Самым простым является случай, когда заселен только наиболее глубокий уровень - основной (нормальный), соответствующий минимуму энергии системы. Из этого состояния, в котором система может находиться неограниченно долго, возможны переходы лишь в состояния с большей энергией, которой соответствуют возбужденные уровни, являющиеся неустойчивыми в отличие от основного, невозбужденного.

Понятие уровня энергии (ε_i) связано с постоянством энергии системы в стационарных состояниях [24]. Заданному значению энергии может соответствовать одно определенное стационарное состояние, называемое невырожденным, либо же ряд состояний - случай вырождения. Кратность вырождения называют еще статистическим весом (s_i). Для примера приведем спектр атома азота [11].



2.4 Газовая динамика.

При газодинамическом описании состояния системы возникает необходимость оперировать своими собственными понятиями (данной теории). Таковыми выступают нижеследующие [12].

Введем в рассмотрение понятие движущегося объема $\omega(t) \subset \mathbb{R}^3$ с поверхностью $\zeta(t)$ состоящая из одних и тех же частиц в любой момент времени t . Движением (или течением) газа в области $\Omega \subset \mathbb{R}^4(\vec{r}, t)$ называется набор функций \vec{v}, ρ, p, U, T (их еще называют газодинамическими), определенных в Ω .

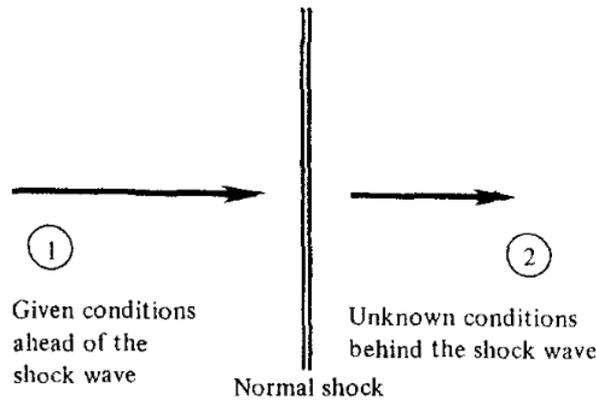
Вводится в рассмотрение принцип отвердевания: изменение массы, импульса и энергии любого движущегося объема $\omega(t)$ в каждый данный момент времени происходит (за счет воздействия извне) так же, как для твердого тела, занимающего объем $\omega(t)$ и имеющего те же самые физико-механические характеристики.

Как явствуют из экспериментов, в потоках, имеющих скорость выше местной скорости звука, возникают такие поверхности $\Sigma(t) \in \mathbb{R}^4$, при переходе через которые газодинамические параметры скачкообразно меняют свое значение. Т.е. по обе стороны от поверхности Σ параметры течения есть гладкие функции, а на самой поверхности эти функции терпят разрыв первого рода. Сама поверхность носит название поверхности сильного разрыва (ПСР). В общем случае эта поверхность $\Sigma = \Sigma(t)$, т.е. изменяется с течением времени. Математически разрывные функции можно записывать следую-

щим образом

$$[f] = f_+ - f_- \quad (3)$$

Здесь знак $[\cdot]$ означает скачкообразное изменение параметра f . Записывая в векторном виде скорость газа \vec{v} и раскладывая на Σ вдоль касательной $\vec{\tau}$ и нормальной \vec{n} к поверхности по единичным векторам, можно ввести в рассмотрение понятие ударной волны, которая характеризуется тем, что для $\vec{v} \cdot \vec{n} = v_n$ выполняется $[v_n] \neq 0$ и остальные параметры также терпят разрыв. Если в ударной волне поверхность Σ имеет нулевую кривизну, т.е. вектор скорости $\vec{v} \perp \Sigma$, то ударная волна называется прямым скачком уплотнения (ПСУ). Схематически это изображается следующим образом



2.5 Состояние газа.

Газ будем считать совершенным. Как известно [13], находящийся в равновесном состоянии совершенный газ с равномерным распределением энергии по степеням свободы является и калорически совершенным — теплоемкости его постоянны. Уравнение состояния такого газа записывается как $p/\rho = RT$ (R — универсальная газовая постоянная) или

$$p = nk_B T. \quad (4)$$

Скорость звука a в совершенном газе вычисляется по формуле

$$a = \sqrt{\kappa p / \rho} \quad (5)$$

Введенное выше определение температуры, по своей сути, есть принцип равномерного распределения энергии по степеням свободы, в другой формулировке которая звучит: "принцип равномерного распределения выполняется только для эргодичных систем, находящихся в термодинамическом равновесии, что подразумевает, что все состояния с равной энергией должны быть заполнены с равной вероятностью." Здесь гипотеза эргодичности подразумевает, что средние по времени значения физических величин, характеризующих систему, равны их средним статистическим значениям. Эта гипотеза для идеальных газов выполняется. Если f — число степеней свободы частицы, тогда

показатель адиабаты можно записать в виде

$$\kappa = \frac{f + 2}{f}. \quad (6)$$

Последним допущением, которым будем пользоваться, является закон Дальтона, относящийся к смесям идеальных газов - давление смеси газов равно сумме парциальных давлений ее компонентов

$$p = \sum_i p_i = \sum_i n_i k_B T. \quad (7)$$

3 Математическое описание модели

3.1 3 типа распределения.

Начнем с описания физической статистики и кинетики газа. В основном мы будем опираться на кинетическую теорию Больцмана.

В начале определимся со статистикой, описывающая газовую систему. В квантовомеханическом рассмотрении нужно учесть принцип тождественности неразличимых частиц. Отсюда же следуют две статистики в зависимости от четности волновой функции при перестановке любых двух частиц. В случае четности волновой функции, частицы должны подчиняться статистике Бозе-Эйнштейна, к которым можно отнести атомы и ионы с четным числом электронов, и статистике Ферми-Дирака для нечетной волновой функции, ей подчиняются, к примеру, электроны. ФР записывается следующим образом

$$f_i = s_i / (e^{\frac{\epsilon_i - \mu}{\beta}} \pm 1), \quad (8)$$

где μ – химический потенциал, а знак \pm соответствует Ферми и Бозе частицам соответственно.

Чтобы не усложнять задачу, вводят в рассмотрение третью статистику - Больцмана, в которую переходят обе вышеизложенные статистики в классическом пределе. Она характеризуется отсутствием обменного эффекта, возникающая на квантовом уровне. Это условие математически выражается как $1 \ll n_i \ll s_i$ [9]. Перейдем теперь к изучению и выводу данной статистики, т.е. к описанию системы частиц, которая подчиняется статистике Больцмана.

При квазиклассическом способе описания состояние газа в целом можно характеризовать с помощью одночастичной ФР $f_i(\vec{u}, \vec{r}, t)$ (для краткости опустим аргументы функции). Последняя определяется т.о., что $f_i d\vec{r} d\vec{u}$ представляет собой среднее число частиц, которые находятся в момент времени t в окрестности точки \vec{r} элемента объема $d\vec{r} = dx dy dz$, обладают скоростью около значения \vec{u} из интервала $d\vec{u} = du_x du_y du_z$ и имеют внутреннее состояние, характеризуемое набором квантовых чисел i (туда входит и сорт частицы s). При этом величины

$$dn_i = f_i d\vec{r} d\vec{u} \quad (9)$$

будут соответствовать математическому ожиданию числа частиц определенного сорта с фиксированной внутренней энергией в элементе фазового объема $d\vec{r} d\vec{u}$.

Изменение числа частиц при движении вдоль фазовой траектории описывается феноменологическим уравнением Больцмана, которое выводится элементарными соображениями и преобразованиями [14].

Для дальнейших упрощений изучаемой модели положим, что внешние поля (сил тяжести и электромагнитное поле) отсутствуют. Учет поля тяжести в газодинамическом подходе для сверхзвуковых потоках малая протяженность изучаемого явления дают примерно 1% ошибку в расчетах, а еще в рамках теории подобия утверждается, что изменение внешних сил будет тем меньше, чем меньше будет масштаб явления

[15]. А так же большие скорости отодвигают на задний план учет вязкости. Тем самым можно считать газ идеальным и в гидродинамическом смысле. Наконец, при больших скоростях обмен теплом с внешним пространством не успевает совершиться - отсюда вытекает возможность ограничиться рассмотрением адиабатических течений. Таким образом получаем модель идеальной сжимаемой адиабатической жидкости (в гидрогазодинамическом понимании). Пренебрежение электромагнитным полем связано с исследуемой задачей и для упрощений в получаемых уравнениях .

3.2 Интегро–дифференциальное уравнение для ионизованного газа

Основное уравнение КТ - уравнение Больцмана, в случае отсутствия внешних полей можно записать в интегро-дифференциальной форме следующим образом [16]

$$D_i f_i = \frac{\partial f_i}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla f_i = J_i(f_i) \quad (10)$$

В левой части стоит полная гидродинамическая производная, характеризующая изменение распределения частиц с течением времени, а правой - столкновительный оператор, характеризующий процесс соударений частиц.

Основная сложность, возникающая из-за присутствия в газе заряженных частиц, связаны с расходимостью столкновительных интегралов. Остановимся на этом чуть подробнее. Эта сложность решается в рамках физики плазмы [17]. В отсутствие магнитных полей в физике плазмы играет важную роль радиус Дебая (расстояние, на которое распространяется в проводящих средах действие электростатического поля заряженной частицы). Использование концепции экранирования существенно упрощает рассматриваемую проблему: можно считать, что взаимодействие между частицами, разделенными расстоянием, большим дебаевского радиуса, осуществляется через электромагнитные поля, в то время как взаимодействия между частицами, находящимися на меньших расстояниях, можно рассматривать как настоящие столкновения. Так образом удастся преодолеть одну из основных трудностей в теории ионизованных газов. На длинах, меньше дебаевской, для достаточно разреженного газа, где не учитывается кулоновский потенциал, можно полностью пренебречь взаимодействиями на малых расстояниях и прийти к бесстолкновительному уравнению Больцмана, или уравнению Власова. Учет данного потенциала взаимодействия приведет к уравнению Фоккера–Планка (или Ландау).

Можно было и не акцентировать внимание на этом, т.к. для нашего локально равновесного течения эти столкновительные интегралы обращаются в ноль.

3.3 Вывод и вид ФР

Перейдем к уточнению ФР. Ее можно вывести двумя методами. Первый заключается в выводе из H -теоремы Больцмана, а второй - из условия максимизации энтропии.

Коротко опишем оба метода. Исходным соображением для обоих подходов является введение в рассмотрение H -функции Больцмана для газа, заключенного в сосуд [18]:

$$H(t) = \sum_i \int f_i \ln \left(\frac{f_i h^3}{s_i m_i^3} \right) d\vec{u} d\vec{r} \quad (11)$$

Здесь множитель $h^3/(s_i m_i^3)$ в логарифме берется из-за квазиклассического приближения. Переобозначим $f_i h^3/s_i m_i^3 = \tilde{f}_i$ и отбросим знак тильды для простоты (это никак не отразится в дальнейших рассуждениях).

В КТ доказывается, что в пространственно однородном газе при отсутствии внешних сил выполняется неравенство

$$dH/dt \leq 0. \quad (12)$$

Это условие есть по сути обобщение H -теорема Больцмана. При доказательстве используются интегральная лемма и тем самым упрощается операция взятия производной от H -функции Больцмана для парных столкновений до следующего вида:

$$\frac{dH}{dt} = -\frac{1}{4} \sum_{ijkl} \int (f'_k f'_l - f_i f_j) \ln \left(\frac{f'_k f'_l}{f_i f_j} \right) W_{ij}^{kl} d\vec{u} d\vec{u}'_1 d\vec{u}'_2 d\vec{u}'_3 d\vec{r}$$

При $t \rightarrow \infty$ функция H стремится к определенному пределу, который соответствует равновесному состоянию газа. Аналогично наоборот, в равновесных состояниях интегральная часть уравнения Больцмана обращается в нуль (для этого достаточно применить интегральную лемму). В целом H -функция Больцмана является обобщением понятия энтропии:

$$S = -k_B H \quad (13)$$

Надо заметить, что из $dH/dt = 0$ следует $f'_k f'_l = f_i f_j$ или $\ln f'_k + \ln f'_l = \ln f_i + \ln f_j$.

В КТ величины ψ_i , удовлетворяющие соотношению вида

$$\psi_i + \psi_j = \psi_k + \psi_l, \quad (14)$$

носят название аддитивных (сумматорных) инвариантов столкновений. Это соотношение по сути говоря есть формальная запись сохранения некоторых характеристик ψ_i . Итак, заметим, что $\ln f_i$ является аддитивным инвариантом. Надо помнить, что аддитивные инварианты представимы в виде линейной комбинации известных аддитивных инвариантов.

Вывести ФР можно и другим путем – из условия максимизации энтропии, где не накладываются какие-либо условия на H -функцию. Основная идея заключается в том, чтобы найти условный экстремум H -функции методом множителей Лагранжа при условии нормировок:

$$\Psi^\lambda = \sum_i \int \psi_i^\lambda f_i d\vec{u}. \quad (15)$$

Здесь Ψ^λ – некоторые экстенсивные параметры, соответствующие интенсивным параметрам ψ_i^λ . Эти условия нормировок берутся из физического смысла ФР.

Решая задачу об определении экстремума функции

$$L = H + \gamma_\lambda \left(\Psi^\lambda - \sum_i \int \psi_i^\lambda f_i d\vec{u} \right), \quad (16)$$

придем к соотношениям

$$\ln f_i = \gamma_\lambda \psi_i^\lambda, \quad \forall i$$

или

$$f_i = \exp(\gamma_\lambda \psi_i^\lambda).$$

Здесь принято соглашение Эйнштейна (об индексном суммировании).

Таким образом, мы пришли к тем же результатам, что и было изложено выше. А именно, логарифм ФР есть линейная комбинация аддитивных инвариантов. Необходимо отметить, что, вообще говоря, коэффициенты Лагранжа γ_λ зависят от координат \vec{r} и времени t , т.е. $\gamma_\lambda = \gamma_\lambda(\vec{r}, t)$.

В общем виде полученные результаты можно записываются так:

$$f_i = s_i \frac{m_i}{h^3} \exp(\gamma_\lambda \psi_i^\lambda), \quad i = 0, \dots, N.$$

Следующим важным пунктом является определение аддитивных инвариантов. Рассмотрим ионизованный одноатомный газ состоящий из нейтралов, ионов (с зарядами $+1, +2$ и т.д.) и электронов e^- . Им можно сопоставить индексы сорта $c = 0, c = 1, \dots, N$ и $c = N + 1$ соответственно. Заметим, что внутреннюю энергию ε_{ci} (для краткости просто ε_i), характеризующую энергию электронных термов тяжелых частиц, имеют лишь нейтральный атом и атом с кратностью ионизации от 1 до $N - 1$ включительно. А электроны и полностью ионизованные атомы имеют лишь поступательную степень свободы.

Известно из физики, что из инвариантности однородного пространства и времени следуют общие законы сохранения импульса и энергии. А кинетическое описание ионизованного газа позволяет ввести еще и два инварианта, соответствующие сохранению общего числа ядра и электронов (как свободных, так и связанных). Учитывая далее еще и определение ФР f_i , среднемассовой, или газовой, скорости \vec{v} , можно уточнить условия нормировок следующим образом:

$$n(\vec{r}, t) = \sum_i \int \psi_i^0 f_i(\vec{u}, \vec{r}, t) d\vec{u} = \sum_{i=0}^{N+1} \int f_i(\vec{u}, \vec{r}, t) d\vec{u} \quad (17)$$

$$\tilde{n}_k = \sum_i \int \psi_i^1 f_i(\vec{u}, \vec{r}, t) \vec{u} = \sum_{i=0}^N \int f_i(\vec{u}, \vec{r}, t) d\vec{u}, \quad (18)$$

$$\tilde{n}_{e^-} = \sum_i \int \psi_i^2 f_i(\vec{u}, \vec{r}, t) \vec{u} = \sum_{i=0}^N (N - i) \int f_i(\vec{u}, \vec{r}, t) d\vec{u} + \int f_{N+1}(\vec{u}, \vec{r}, t) d\vec{u}, \quad (19)$$

$$\begin{aligned} \rho(\vec{r}, t)U(\vec{r}, t) &= \sum_i \int \psi_i^3 f_i(\vec{u}, \vec{r}, t) d\vec{u} = \\ &= \sum_{i=0}^{N-1} \int (m_i \vec{u}^2 / 2 + \varepsilon_i) f_i(\vec{u}, \vec{r}, t) d\vec{u} + \sum_{i=N}^{N+1} \int \frac{m_i \vec{u}^2}{2} f_i(\vec{u}, \vec{r}, t) d\vec{u}, \quad (20) \\ \rho(\vec{r}, t)\vec{v}(\vec{r}, t) &= \sum_i \int \vec{\psi}_i f_i(\vec{u}, \vec{r}, t) d\vec{u} = \sum_{i=0}^{N+1} \int m_i \vec{u} f_i(\vec{u}, \vec{r}, t) d\vec{u} \quad (21) \end{aligned}$$

Поясним эти соотношения. Аддитивные инварианты $\psi_i^1 = 1$, $\psi_i^3 = m_i u^2 / 2 + \varepsilon_i$ (считаем, что для электронов и ядер без электронной оболочки $\varepsilon_i = 0$) и $\vec{\psi}_i = m_i \vec{u}$ соответствуют сохранению общего числа частиц n , удельной внутренней энергии ρU и импульса $m_i \vec{u}$ соответственно. Сохранение общего числа частиц при $\psi_i^1 = 1$ есть обобщение сохранения массы, соответствующее инварианту $\psi_i = m_i$. Из физического смысла числа частиц и плотности газа – они суть аддитивные величины – следует

$$n = \sum_i \int f_i d\vec{u} \doteq \sum_i n_i \quad (22)$$

$$\rho = \sum_i m_i n_i = m_k \tilde{n}_k + m_e \tilde{n}_e \quad (23)$$

Т.е. плотность частиц n определяется суммой заселенностей частиц n_i на i -м энергетическом уровне. А плотность газа ρ состоит из суммы частей газа. Последними могут выступать как уровни заселенности n_i со своими массами, так и общие концентрации тяжелых \tilde{n}_k и легких \tilde{n}_e частиц со своими массами ядра m_k и электрона m_e . Отметим, что всюду k в индексах характеризует ядро (kernel - ядро с нем.).

Оставшиеся столкновительные инварианты ψ_i^1 и ψ_i^2 определяются следующими соотношениями:

$$\psi_0^1 = 1, \quad \psi_1^1 = 1, \quad \dots \quad \psi_N^1 = 0, \quad \psi_{N+1}^1 = 0, \quad (24)$$

$$\psi_0^2 = N - 0, \quad \psi_1^2 = N - 1, \quad \dots \quad \psi_N^2 = N - N, \quad \psi_{N+1}^2 = 1. \quad (25)$$

Для дальнейшей записи общего вида ФР рассмотрим преобразование следующего типа:

$$\begin{aligned} \gamma_0 + \gamma_3(m_i u^2 / 2 - \varepsilon_i) + \vec{\gamma} \cdot m_i \vec{u} &= \gamma_3 \left(\frac{m_i}{2} (\vec{u} + \vec{\gamma} / \gamma_3)^2 - \varepsilon_i \right) + \gamma_0 - \frac{m_i \gamma^2}{2\gamma_3} = \\ &= \gamma_3 \left(\frac{m_i}{2} (\vec{u} + \vec{\tilde{\gamma}})^2 - \varepsilon_i \right) + \tilde{\gamma}_0 = \gamma_3 (m_i \vec{c}^2 / 2 - \varepsilon_i) + \gamma_0. \end{aligned}$$

Здесь введены новые обозначения $\vec{\gamma} / \gamma_3 = \vec{\tilde{\gamma}}$, $\vec{u} + \vec{\tilde{\gamma}} = \vec{c}$, $\gamma_0 - m_i \gamma^2 / 2\gamma_3 = \tilde{\gamma}_0$ и для простоты опущен знак тильда.

И тогда ФР запишется

$$f_i = s_i \frac{m_i^3}{h^3} \exp(\gamma_0 + \gamma_1 \psi_i^1 + \gamma_2 \psi_i^2 + \gamma_3 \psi_i^3), \quad i = \overline{0, N+1}$$

Заметим, что можно определить два из четырех коэффициентов Лагранжа γ_i . Для этого подставим ФР в условие нормировки для массовой скорости и учитывая четность ФР относительно инверсии по пространству скоростей (в переходе из скоростей \vec{u} к скоростям \vec{c}), можно получить $\vec{\gamma} = -\vec{v}$, т.е.

$$\vec{c} = \vec{u} - \vec{v}. \quad (26)$$

В КТ эту скорость называют собственной (или, реже, тепловой).

Подставляя далее ФР в условие нормировки полной внутренней энергии и вводя полную собственную энергию, с учетом принципа равнораспределения энергии по степеням свободы получим

$$\gamma_3 = -\frac{1}{k_B T}. \quad (27)$$

Отметим, что полная собственная энергия определяется как

$$\rho(\vec{r}, t) E(\vec{r}, t) = \rho(\vec{r}, t) U(\vec{r}, t) - \rho(\vec{r}, t) \vec{v}^2(\vec{r}, t), \quad (28)$$

а принцип равнораспределения энергии математически выражается как сумма поступательных и внутренних степеней свободы, т.е

$$\rho E = \frac{3}{2} n k_B T + e_{int}. \quad (29)$$

Данное соотношение представляет собой кинетическое определение температуры T газа. Несмотря на то, что в газе присутствуют как тяжелые, так и легкие частицы, то правильной было бы ввести отдельно температуру для тяжелых частиц и отдельно для легких, а это предположение уже выводит нас за области равновесной кинетики [19]. Таким образом, мы делаем допущение, что в каждом бесконечно малом объеме установилась локально-равновесная температура $T(\vec{r}, t) = T_{atom} \approx T_{ion} \approx T_{elec}$.

Наконец, подставляя ФР в условие нормировки для общего числа частиц n , имеем

$$e^{\gamma_0} = n/Q, \quad (30)$$

где

$$Q = \sum_i s_i (2\pi m_i k_B T / h^2)^{3/2} \exp(\gamma_1 \psi_i^1 + \gamma_2 \psi_i^2 + \gamma_3 \varepsilon_i).$$

Итак, после введения всех этих обозначений и проделанных преобразований, ФР можно переписать в собственных скоростях $f_i(\vec{u}, \vec{r}, t) = \tilde{f}_i(\vec{c}, \vec{r}, t)$ следующим образом (для простоты в дальнейшем опустим знак тильда):

$$f_i(\vec{c}, \vec{r}, t) = s_i m_i^3 \frac{n}{Q} \exp\left(-\frac{m_i \vec{c}^2 / 2 + \varepsilon_i}{k_B T} + \gamma_1 + (N - i) \gamma_2\right), \quad i = \overline{0, N}, \quad (31)$$

$$f_i(\vec{c}, \vec{r}, t) = s_i m_i^3 \frac{n}{Q} \exp\left(-\frac{m_i \vec{c}^2}{2k_B T} + \gamma_2\right), \quad i = N + 1 \quad (32)$$

3.4 Метод статсумм.

Если вспомнить определение ФР, то условия нормировок можно переписать в виде

$$n(\vec{r}, t) = \sum_{c=0}^N \sum_i \int f_{c,i} d\vec{c} = \sum_{c=0}^{N+1} \sum_i n_{c,i} = \sum_{c=0}^{N+1} n_c \quad (33)$$

$$\tilde{n}_k(\vec{r}, t) = \sum_{c=0}^N \sum_i \int f_{c,i} d\vec{c} = \sum_{c=0}^N n_c, \quad (34)$$

$$\tilde{n}_e(\vec{r}, t) = \sum_{c,i} (N - c) \int f_{c,i} d\vec{c} + \int f_{N+1} d\vec{c} = \sum_{c=0}^N (N - c) n_c + n_{N+1} \quad (35)$$

$$\rho(\vec{r}, t) E(\vec{r}, t) = \sum_{c=0}^{N-1} \sum_i \int (m_c \vec{c}^2 / 2 + \varepsilon_{c,i}) f_{c,i}(\vec{c}, \vec{r}, t) d\vec{c} + \sum_{c=N}^{N+1} \int \frac{m_c \vec{c}^2}{2} f_c(\vec{c}, \vec{r}, t) d\vec{c}. \quad (36)$$

Введем в рассмотрение понятие статистической суммы $Z = \sum_i s_i \exp(-\varepsilon_i / k_B T)$, где энергия ε_i характеризует как внутреннего состояния, так и поступательного движения. Она обладает свойством мультипликативности – статумма для системы, состоящей из двух не взаимодействующих частей, равна произведению статсумм каждой части. Это свойство является следствием аддитивности энтропии (это обстоятельство выводится в рамках статистической ТД). А т.к. энергия поступательного движения не зависит от энергии ее внутренних степеней свободы, то $Z^{tot} = Z^{tr} \cdot Z^{int}$ (для простоты опустим далее обозначение tot над полной статсуммой). Тогда статсумма для объема газа V численно выражается следующими формулами [18],[26]:

$$Z^{tr}(T) = \frac{V}{h^3} \int e^{-\frac{m u^2}{2k_B T}} d\vec{u} = \frac{V}{h^3} (2\pi m k_B T)^{3/2}, \quad (37)$$

$$Z^{int}(T) = \sum_i s_i e^{-\frac{\varepsilon_i}{k_B T}} \quad (38)$$

Теперь можем еще упростить формулы для равновесных концентраций, если пе-

рейдем от ФР к статсуммам:

$$n = \sum_{c=0}^N \sum_i \int f_{c,i} d\vec{c} = \sum_{c=0}^N Z_c e^{\gamma_1 + (N-c)\gamma_2} + Z_{N+1} e^{\gamma_2}, \quad (39)$$

$$\tilde{n}_k = \sum_{c=0}^N \sum_i \int f_{c,i} d\vec{c} = \sum_{c=0}^N Z_c e^{\gamma_1 + (N-c)\gamma_2}, \quad (40)$$

$$\tilde{n}_{e^-} = \sum_{c,i} (N-c) \int f_{c,i} d\vec{c} + \int f_{N+1} d\vec{c} = \sum_{c=0}^N (N-c) Z_c e^{\gamma_1 + (N-c)\gamma_2} + Z_{N+1} e^{\gamma_2}. \quad (41)$$

Для будущих вычислений нам понадобится следующее соображение: если известны значения общих концентраций тяжелых и легких частиц, то зная температуру и энергетические спектры, можем определить e^{γ_1} и e^{γ_2} . Действительно, рассматривая два последние уравнение относительно переменных $x = e^{\gamma_1}$ и $y = e^{\gamma_2}$, эти уравнения можно свести к одному [20]. Из первого из них сразу найдем

$$x = \frac{\tilde{n}_k}{\sum_c Z_c y^{N-c}}. \quad (42)$$

Подставка во второе даст

$$Z_0 Z_{N+1} y^{N+1} + \sum_{c=1}^N (Z_c Z_{N+1} - \tilde{n}_k (c-1) Z_{c-1}) y^{N+1-c} - \tilde{n}_{e^-} Z_N = 0. \quad (43)$$

Решая это алгебраическое уравнение любыми численными методами (в случае, если не существует аналитическое решение), найдем равновесные концентрации компонентов ионизованного газа. Это означает, что определение равновесного состава газа в условиях, когда возможна N -кратная ионизация атомов, можно свести к решению одного алгебраического уравнения степени $N+1$.

Заметим, что равновесные концентрации n_c должны удовлетворять УЗДМ для каждого процесса ионизации-нейтрализации, протекающего в смеси в противоположных направлениях, а также уравнениям сохранения массы и заряда. Процессы ионизации-нейтрализации в рассматриваемых газах схематически можно представить в виде:

$$(c) + X \leftrightarrow (c+1) + (N+1) + X, \quad c = 0, \dots, N-1. \quad (44)$$

Здесь X — любая частица, присутствующая в смеси. Каждому из этих процессов можно поставить в соответствие УЗДМ:

$$\frac{(n_{c+1}/n)(n_{N+1}/n)}{n_c/n} = K_c^{eq}(T), \quad (45)$$

где температурная функция $K_c^{eq}(T)$, которую раньше [7] называли константой равновесия ионизации частиц сорта c , имеет вид

$$\frac{Z_{c+1}(T) Z_{N+1}(T)}{n Z_c(T)} = K_c^{eq}(T) \quad (46)$$

Легко видеть, что распределения n_c , выписанные через статсуммы, удовлетворяют вышеприведенным соотношениям при любых значениях γ_1 и γ_2 .

3.5 Уравнения на ПСУ

Теперь рассмотрим газодинамическую часть работы. Как отмечалось ранее, в сверхзвуковых потоках возникают ПСР и на них нарушаются законы сохранения, но все же имеют место соотношения, связывающие параметры течения по обе стороны от ПСР. В дальнейшем нас не будет интересовать сама структура зоны, отделяющую газ, ибо там уже не применимы наши равновесные методы исследования. Оставляя в стороне и то, какую протяженность имеет эта зона и протекающие там физико-химические процессы, перейдем к чисто математическому описанию равновесного состояния этих двух сред.

Вывод соотношений удобнее всего начать с интегральной формы, которая по сути является лишь чисто математической формой записи феноменологического описания процесса переноса газового объема [12].

Если ввести в рассмотрение общий вид любого типа сохранения следующим образом:

$$\frac{d}{dt} \int_{\omega(t)} f d\omega + \int_{\varsigma(t)} \vec{\varphi} \cdot \vec{n} d\varsigma = 0, \quad (47)$$

где функции f и φ определены в области Ω .

Методами математического анализа и векторной алгебры легко выводится лемма: производная интеграла по движущемуся объему равняется

$$\frac{d}{dt} \int_{\omega(t)} f d\omega = \int_{\omega(t)} \left(\frac{df}{dt} + f \operatorname{div} \vec{v} \right) d\omega, \quad \text{где } \frac{d \cdot}{dt} = \frac{\partial \cdot}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla). \quad (48)$$

Применяя для поверхностного интеграла в уравнении сохранения формулу Гаусса-Остроградского, и считая, что \vec{v} , f , φ имеют непрерывные производные, то закон сохранения перепишется

$$\int_{\omega(t)} (f_t + \operatorname{div}(f\vec{v} + \vec{\varphi})) d\omega = 0, \quad \text{где } f_t = \frac{\partial f}{\partial t}.$$

Если теперь проинтегрировать последнее по t в интервале (t_1, t_2) , то

$$\int_{t_1}^{t_2} \int_{\omega(t)} (f_t + \operatorname{div}(f\vec{v} + \vec{\varphi})) d\omega dt = 0. \quad (49)$$

Если ввести новое обозначение

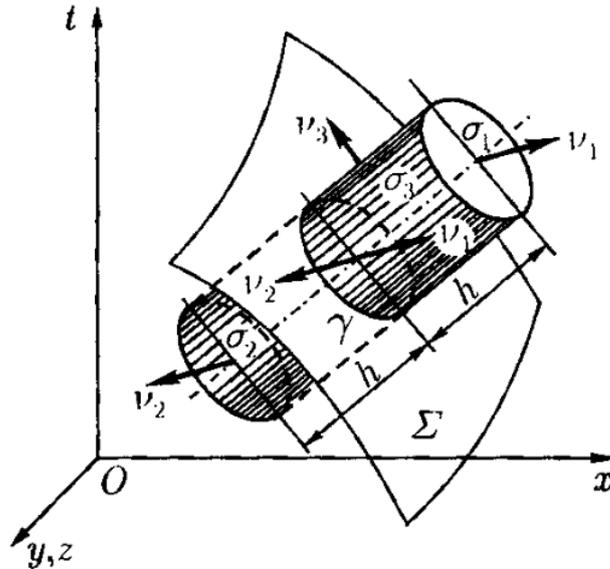
$$\vec{g} = (f, f v_1 + \varphi_1, f v_2 + \varphi_2, f v_3 + \varphi_3),$$

где v_i и φ_i проекции к орт векторам в исследуемой прямоугольной системе координат. Введем еще $\vec{\nu}$ – орт внешней нормали к $\Gamma = \partial\Omega$ (т.е. к границе). Если обозначить

через \vec{l} – орт оси t и \vec{n} – орт внешней нормали к Γ гиперплоскостью $t = const$, то $\vec{v} = \vec{l}\cos(\vec{v}, t) + \vec{n}\sin(\vec{v}, t)$ и, следовательно, уравнение сохранения запишется в виде

$$\int_{\Gamma} (f\cos(\vec{v}, t) + (f\vec{v} + \vec{\varphi}) \cdot \vec{n}\sin(\vec{v}, t))d\Gamma = 0 \quad (50)$$

Теперь все готово для вывода уравнений на ПСР.



На гиперповерхности Σ выделяется некоторая (малая) область σ с гладкой границей и строится замкнутая гиперповерхность $\Gamma = \sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3$, где σ_3 есть "боковая поверхность" цилиндра, а σ_1 и σ_2 – куски "параллельных" к Σ поверхностей, находящихся на расстоянии h от Σ , вырезанные этим цилиндром. В последнем соотношении с так построенной гиперповерхностью Γ интеграл разобьется на сумму трех интегралов – по σ_1, σ_2 и σ_3 . Затем выполняется предельный переход при $h \rightarrow 0$. Так как мера $|\sigma_3| \rightarrow 0$ и подынтегральная функция ограничена, то интеграл по σ_3 в пределе дает нуль. Что же касается интегралов по σ_1 и σ_2 , то они в пределе перейдут в интегралы по разным сторонам σ с противоположными направлениями нормалей $\vec{v}_1 = -\vec{v}_2$. Пусть \vec{v} – одно из этих направлений и тогда, вспоминая обозначение для скачка функции на Σ , в пределе получится соотношение

$$\int_{\sigma} [f\cos(\vec{v}, t) + (fv_n + \varphi_n)\sin(\vec{v}, t)]d\sigma = 0, \quad (51)$$

где $v_n = \vec{v} \cdot \vec{n}$ и $\varphi_n = \vec{\varphi} \cdot \vec{n}$. Отсюда, ввиду произвольности области $\sigma \subset \Sigma$ и непрерывности подынтегрального выражения на Σ , получается уравнение сильного разрыва в общем виде

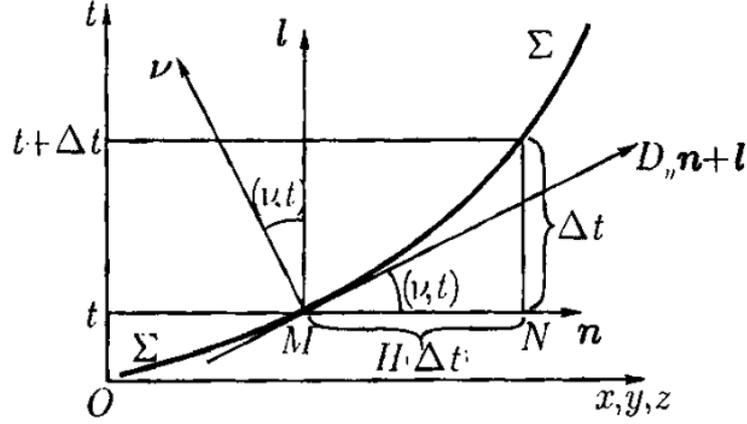
$$[f\cos(\vec{v}, t) + (fv_n + \varphi_n)\sin(\vec{v}, t)] = 0. \quad (52)$$

Последним необходимым параметром является перемещения ПСР D_n вдоль нормали \vec{n} к Σ . Берется точка $M \in \Sigma(t)$ и находится точка N пересечения нормали в

M к $\Sigma(t)$ с поверхностью $\Sigma(t + \Delta t)$. Пусть $H(\Delta t)$ есть длина отрезка $|\overrightarrow{MN}|$, тогда можем определить это перемещение следующим образом:

$$D_n = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{H(\Delta t)}{\Delta t} \quad (53)$$

Заметим связь между D_n и \vec{v} : $D_n \sin(\vec{v}, t) + \cos(\vec{v}, t) = 0$, т.к. вектор $D_n \vec{n} + \vec{l}$ лежит в касательной плоскости к $\Sigma(t)$.



Т.к. скорость перемещения D_n поверхности $\Sigma(t)$ конечна, то $\sin(\vec{v}, t) \neq 0$, а тогда вводя в рассмотрение величину

$$v_n - D_n = \theta, \quad (54)$$

уравнение для сильного разрыва можно переписать в виде $[f\theta + \varphi_n] = 0$ или, в силу линейности скачка $[\cdot]$,

$$[f\theta] + [\varphi_n] = 0. \quad (55)$$

Величина θ носит название скоростью распространения ПСР.

Заметим, что для стационарных ударных волн величина $D_n = 0$, следовательно $\theta = v_n$, и для ПСУ последнее переписывается как $\theta = v = |\vec{v}|$. Подставляя для абстрактного уравнения на ПСР явные значения для параметров f и φ_n , получим известные законы сохранения, связывающие обе стороны от ПСР.

Если взять $f = \rho v$ и $\varphi_n = p$, то имеем уравнение сохранения импульса на ПСР:

$$\rho^+(v^+)^2 = \rho^-(v^-)^2. \quad (56)$$

Если взять $f = \Psi^\lambda$ ($\lambda = 1, 2$) и $\varphi_n = 0$, то имеем уравнение сохранения для общего числа ядер и электронов на ПСР: $[\Psi^\lambda v] = 0$. Последнее математически понимается как непрерывность величины $\Psi^\lambda v$. Итак, имеем два соотношения, из которых легко выводится классическое уравнение неразрывности $[\rho v] = 0$. Для этого достаточно вспомнить свойство аддитивности плотности газа $\rho = m_k \tilde{n}_k + m_e \tilde{n}_e$. Таким образом имеем обобщение уравнения сохранения массы - сохранения общего числа тяжелых и легких частиц:

$$\tilde{n}_k^+ v^+ = \tilde{n}_k^- v^-, \quad \tilde{n}_e^+ v^+ = \tilde{n}_e^- v^-. \quad (57)$$

В ТД вводят понятие полной удельной энтальпии как $H = \frac{v^2}{2} + E + \frac{p}{\rho}$, тогда беря в качестве $f = \rho v^2/2 + \rho E$ и в качестве $\varphi_n = pv$, после простых преобразований получим уравнение сохранения энергии $[H] = 0$ (заметим, что по своему виду это соотношение совпадает с уравнением Бернулли на линиях тока). Раскрывая скобку разрыва придем к соотношению

$$\frac{(v^+)^2}{2} + E^+ + \frac{p^+}{\rho^+} = \frac{(v^-)^2}{2} + E^- + \frac{p^-}{\rho^-}. \quad (58)$$

Сделаем одно небольшое замечание по поводу вывода уравнений на ПСР. Выше был представлен классический вывод, который изучается в рамках газовой динамики. Эти же соотношения можно получить исходя из кинетических соображений, рассматривая сохранение признаков по разные стороны от ПСР [23].

В сверхзвуковой газовой динамике из уравнений на сильном разрыве путем исключения из уравнений скорость газа переходят к одному уравнению, связывающий чисто ТД параметры по обе стороны от ударной волны и тем самым можно будет вывести общие для всех сильных разрывов свойства. Если вводить в рассмотрение изменение энтропии газа, то выясняется, что она не может быть непрерывной при переходе через ПСР, а является возрастающей (с ростом давления), в силу второго начала ТД. Отсюда можно сделать далеко идущие выводы. Одним из таких является не равнозначность сторон ударного фронта, точнее, ударная волна всегда вызывает повышение давления и сжатие (уплотнение) газа; ударные волны разрежения невозможны. Вторым важным свойством, описываемое теоремой Цемплена, является то обстоятельство, что абсолютная величина нормальной составляющей скорости движения газа относительно ударной волны больше местной скорости звука перед фронтом и меньше местной скорости звука за фронтом.

В теории ПСУ для совершенного газа (считаем, что показатель адиабаты $\kappa = c_p/c_v$ постоянен по обе стороны; хотя это грубое допущение) из уравнений на ПСР довольно простыми преобразованиями выводятся соотношения, связывающие параметры течения по обе стороны от ПСР через безразмерное число Маха $M = v/a$. В дальнейшем нам понадобится лишь два из них [21],[13]:

$$v^+/v^- = 1 - \frac{2}{\kappa} + \frac{2(M^-)^{-2}}{\kappa + 1} \quad (59)$$

$$T^+/T^- = 1 + \frac{2(\kappa - 1)}{(\kappa + 1)}((M^-)^2 - 1)((M^-)^{-2} + \kappa) \quad (60)$$

4 Численное описание модели

4.1 Алгоритм действия

Перейдем теперь к изложению численной стороны исследуемой задачи.

Изначально задаются параметры газа на входе (т.е. задаются правые части уравнений на ПСР). Считаем, что на входе задана определенная скорость течения и концентрация компонент газа, а температура течения варьируется в каком-то диапазоне. В дальнейшем мы не будем привлекать уравнение энергии, тогда мы имеем систему из четырех уравнений (уравнения на ПСР и уравнение состояния) с четырьмя неизвестными $\{v^+, T^+, \gamma_1^+, \gamma_2^+\} \sim \{v^+, T^+, x^+ = e^{\gamma_1^+}, y^+ = e^{\gamma_2^+}\}$.

Заметим следующую цепочку связей:

Зная относительные концентрации сортов n_c^-/n^- (где $n^- = \sum_c n_c^-$) и температуру среды T^- , найдем давление $p^- = n^- k_B T^-$, плотность $\rho^- = \sum_c m_c n_c^-$, а также местную скорость звука $a^- = \sqrt{\kappa p^- / \rho^-}$, и тем самым вычислим число Маха $M^- = v^- / a^-$. Из известного числа Маха перед ПСУ можно найти скорость v^+ и температуру T^+ за ПСУ. А из уравнений сохранения тяжелых и легких частиц на ПСР найдем \tilde{n}_k^+ и \tilde{n}_e^+ .

Обратим внимание, что энергия возбужденных электронных состояний весьма велика [28], и их вклад в значения ТД величин мал. Поэтому в электронной сумме по состояниям необходимо учитывать лишь основное и нижележащие возбужденные состояния. Поэтому в расчетах внутренних статсумм мы учтем лишь первые три термы. А тогда из известной температуры и энергетических термов найдем полную статсумму $Z_c^+ = Z_c^+(T^+)$, и тогда, как было отмечено ранее, решив алгебраическое уравнение относительно y^+ , найдем x^+ , а следовательно, и концентрации сортов n_c^+ . Тем самым удастся определить состояние газа за ПСУ. Для численных иллюстраций нам еще понадобится такая важная величина, как степень ионизации α .

4.2 Численные результаты и их анализ

I. Возьмем в качестве численных расчетов следующие значения (как говорилось выше, индексы 0 и 1 характеризуют атом азота и ион азота, а индекс 2 - электрон):

частицы: $n_0^- = 0.6N_L$, $n_1^- = 0.25N_L$, $n_2^- = 0.15N_L$, где $N_L = 2.68 * 10^{25} m^{-3}$

скорости (m/s): $v^- = \{2500, 3500, 4500\}$

температуры из интервала (K): $T^- \in [500, 5500]$

На рис. ниже пунктиром нарисованы графики, соответствующие параметрам перед ПСУ. Ниже представляем графики зависимостей концентрации сортов (атомов, ионов и электронов) отнесенные к общему числу тяжелых и легких частиц за ПСУ, т.е. зависимость n_0^+/\tilde{n}_k^+ , n_1^+/\tilde{n}_k^+ , n_2^+/\tilde{n}_e^+ и ρ^+ от T^+ при трех различных скоростях потока перед ПСУ.

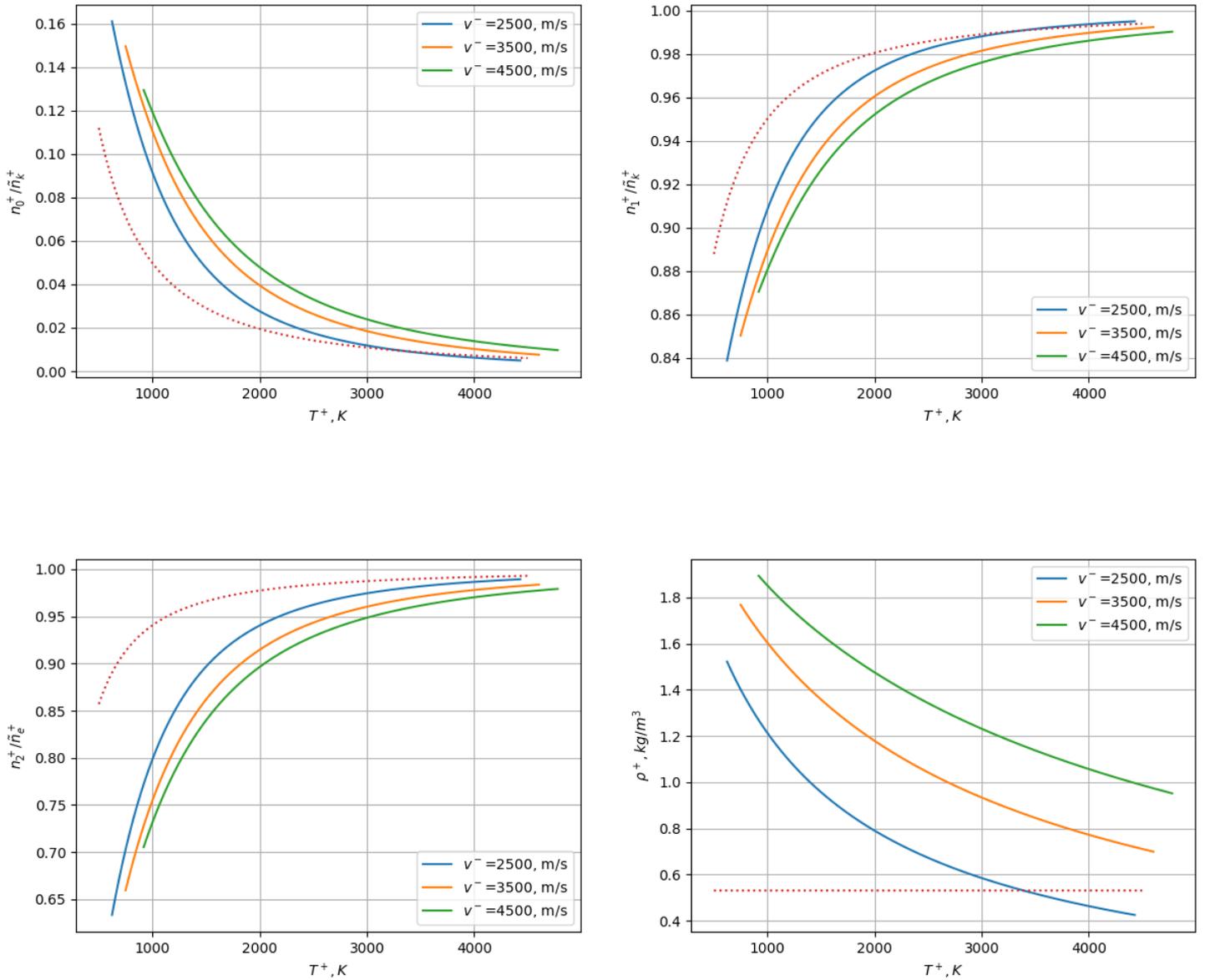


Рис. 1: Пунктиром - зависимость n_c^- / \tilde{n}^- и ρ^- от T^-

Заметим, что хотя плотность потока перед ПСУ на последнем графике кажется постоянной, но на самом деле медленно (с повышением температуры), но растет. Это увидим на рис. ниже. Здесь она меняет значение в пределах $\rho^- \in [0.5311621, 0.5311641]$ с разницей $\Delta\rho^- = 1.95e - 06$ (в дальнейшем размерности при анализе не будем приводить, т.к. они все представлены в соответствующих местах на графиках).

Из представленных графиков видно, что повышение относительных концентраций атомов находится в прямой зависимости к скоростям на входе, а ионы с электронами - в обратной. Рост при этом относительно медленно для ионов и электронов (порядка 1 %), а для атомов быстрее (от 30 до 40 %) при изменении скорости на 1 km/s . А вот с температурной зависимостью дело обстоит наоборот. Относительные концентрации атомов убывают с повышением температуры, а ионы с электронами растут. Это и ясно,

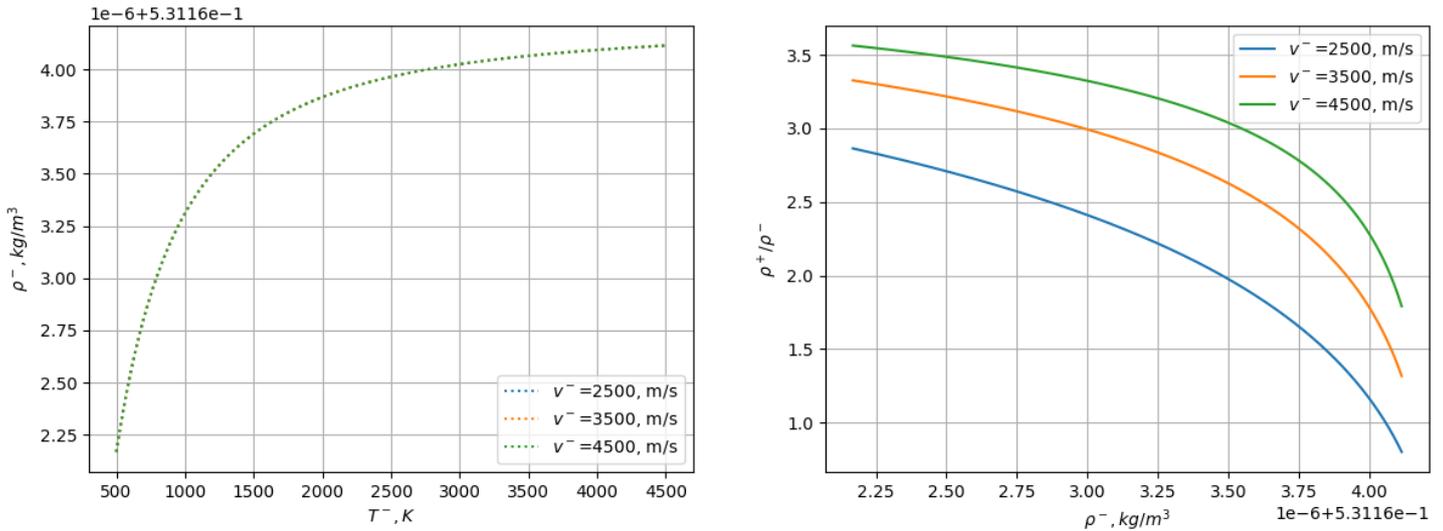


Рис. 2

т.к. повышение температуры ведет к процессу ионизации, т.е. отрыву от нейтралов отрицательно заряженных частиц. Даже если и нейтралы с заряженными частицами имеют обратную зависимость с температурой, но все же массовая плотность газа уменьшается с ростом температуры, и повышаются с ростом скорости. Заметим, что для температур выше 3200 K плотность газа за ПСУ меньше, чем на входе. Получается, что такая комбинация скорости с температурой не реализуем на практике. Об этом утверждалось в теореме Цемплена. Похожие результаты обнаружатся и на дальнейших рис. и все они объясняются этой теоремой, поэтому мы не будем акцентировать внимание на этом и будем учитывать лишь физически оправданные области изменения параметров. Из последнего рис. заметим, что степень сжатия (т.е. отношение плотностей) ПСУ тем больше, чем выше скорость на входе. Это сжатие не может расти до бесконечности, т.е. эти кривые хоть и поднимаются выше по оси ординат, но с повышением скорости видно, что они приближаются к некоторому предельному значению. Этот результат уже известен из теории скачков уплотнения [27].

Интересная картина наблюдается для числа Маха за ПСУ.

Из первого рис. делаем вывод, что для ионизирующегося газа за ПСУ имеются минимумы числа Маха. Видим, что для скоростей до 2.5 km/s на входе поток за ПСУ очень быстро разгоняется начиная с некоторой температуры $T^+ = T^+|_{M_{min}^+}$ до $T^+|_{M=1}$. А при больших значениях потока на входе скорость потока за ПСУ изменяется медленнее. Заметим, что нефизичный результат, полученный при анализе плотностей концентраций, виден и на этих графиках – здесь $M^+|_{T^+ > 3200} > 1$, для $v^- = 2500$.

Из правого рис. можно сделать вывод, что с увеличением скорости v^- отношение (изменение) скоростей потока с обеих сторон становится все больше. И это изменение тем больше, чем больше скорость на входе. И все же, с повышением температуры это относительное изменение уменьшается.

Из рис. для давлений видно, что за ПСУ давление на некотором промежутке тем-

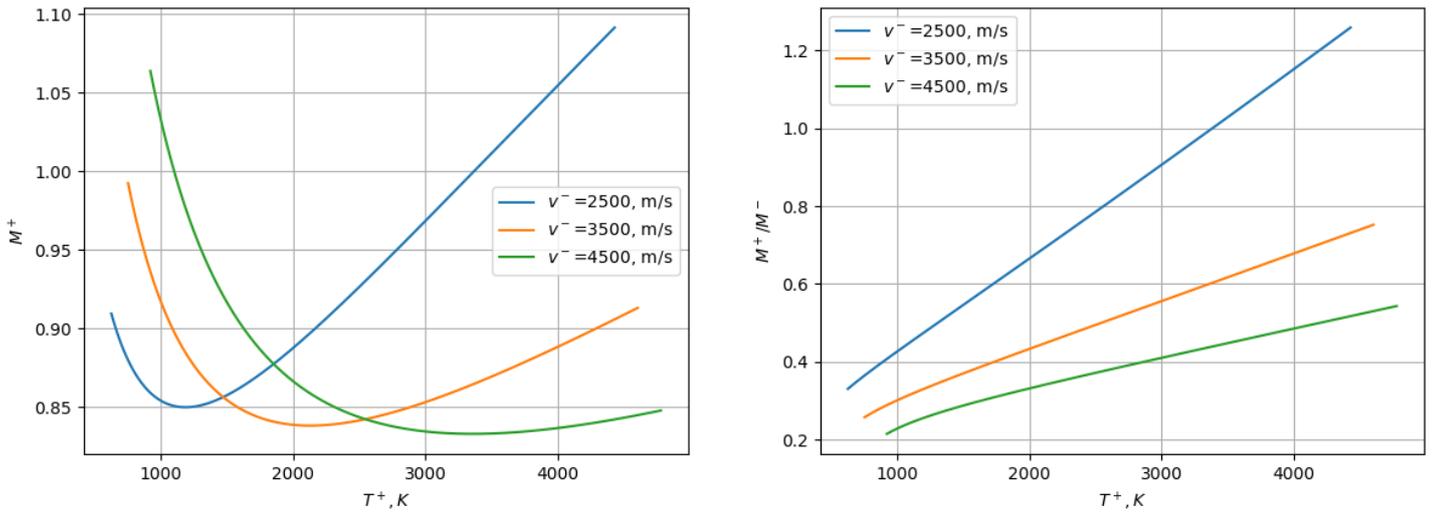


Рис. 3

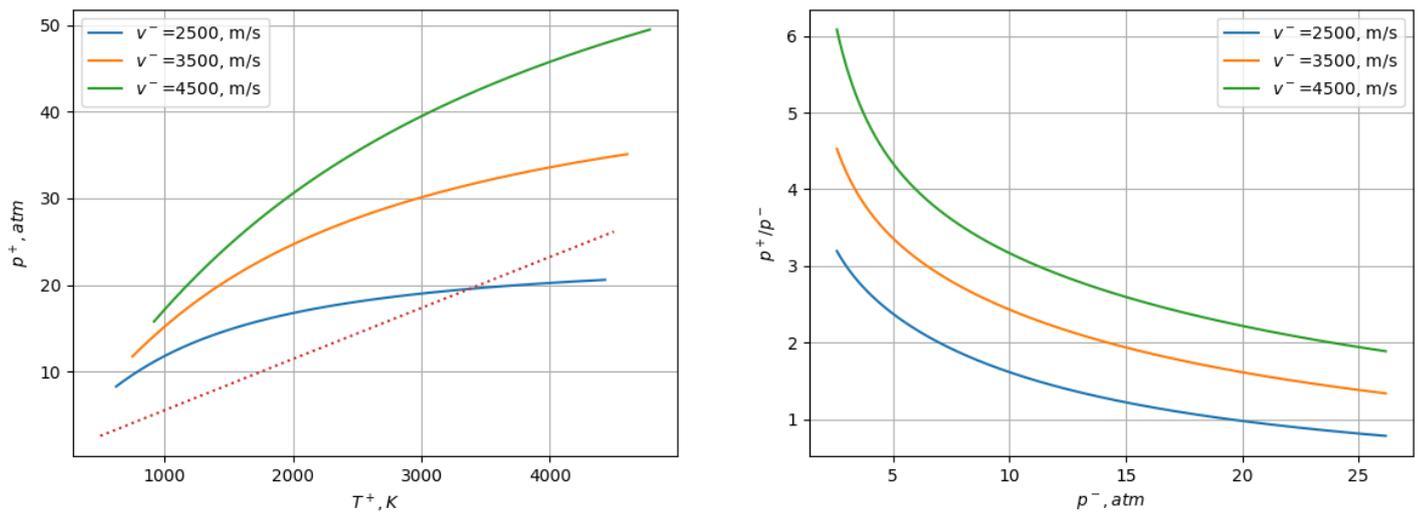


Рис. 4: Пунктиром - зависимость $p^-(T^-)$

пературы подчиняется закону Клапейрона-Менделеева, а затем она нарушается. Это значит что для этого явления необходимо вводить поправки к уравнению состояния, т.е. нужно учесть силы взаимодействия между частицами (т.е. надо перейти к теории Ван-дер-Ваальса), чтобы объяснить характер искривления графиков. Это и понятно, что с повышением плотности, модель идеального (в ТД смысле) газа теряет силу. Но заметим, что с повышением скорости на входе эта кривая "распрямляется", т.е. уже описывается нашей моделью. Видим еще, что с повышением температуры повышение скорости не приведет к дальнейшему росту интенсивности скачка. Похожее заключение было сделано ранее.

Обратим теперь внимание на следующие графики

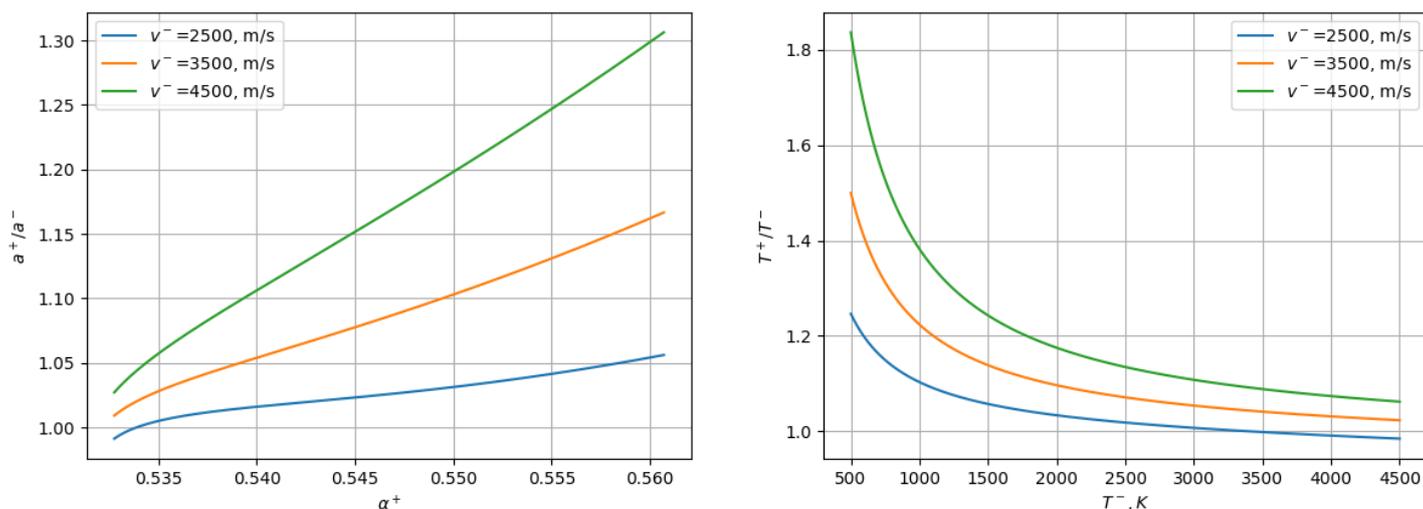


Рис. 5

На первом рис. замечаем, что с повышением степени ионизации изменение местных скоростей звука тем больше, чем больше скорость потока на входе. Из наклона кривых видно, что большим входным скоростям соответствуют большие изменения скорости звука при малом увеличении степени ионизации.

Второй рис. интересен тем, что, как это было приведено в теоретической части, есть зависимость между скоростью потока и его температурой. Хотя и для малых температур на входе отношение температур повышается почти двухкратно, но все же это значение с повышением температуры устанавливается в районе около 1.2-1.3 сколько бы мы не увеличивали скорость потока.

Посмотрим на изменение плотностей концентраций сортов с другой стороны:

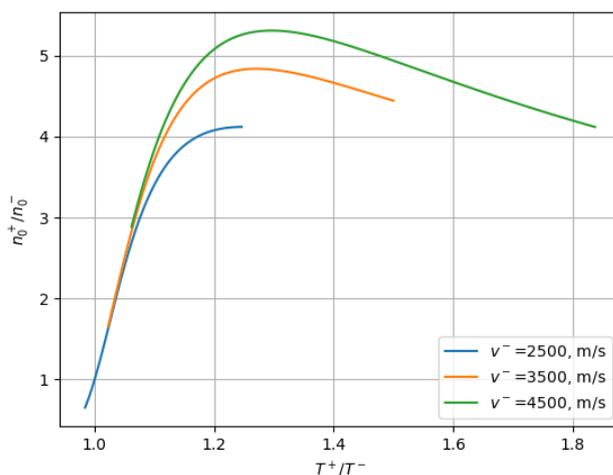


Рис. 6

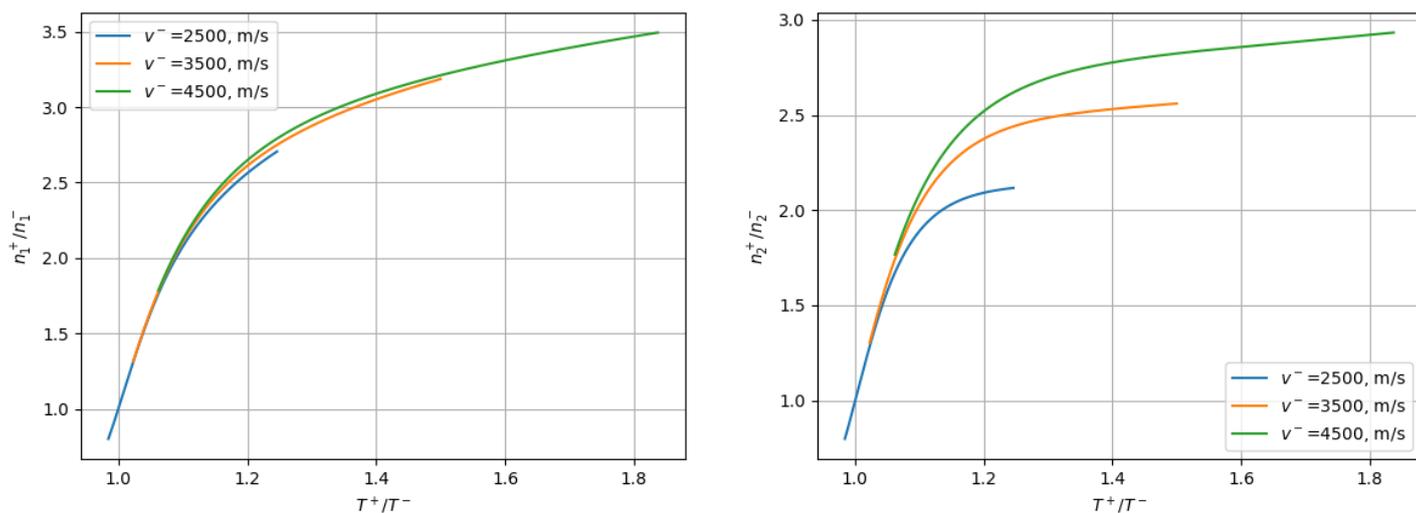


Рис. 7

Видно, что как атомы, так и заряженные частицы не растут очень много. Концентрация атомов вначале растет стремительно быстро с ростом относительной температуры и доходит до некоторого максимального значения, а затем идет на спад. Аналогичная картина наблюдается для двух других компонент, хотя для них явный экстремум для приведенных скоростей плохо наблюдается, для этого надо брать большие скорости. В целом наблюдается повышение концентраций за ПСУ по отношению к концентрациям перед ПСУ.

II. А теперь поменяем начальные параметры на следующие:

частицы: $n_0^- = 0.6N_L * 10^k$, $n_1^- = 0.25N_L * 10^k$, $n_2^- = 0.15N_L * 10^k$,

где $k = \{-5, -4, -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3, 4, 5\}$

скорость (m/s): $v^- = 2500$

температуры из интервала (K): $T^- \in [500, 5500]$

Из этих расчетов постараемся узнать, как влияет на параметры потока за ПСУ изменение начальной концентрации (плотности).

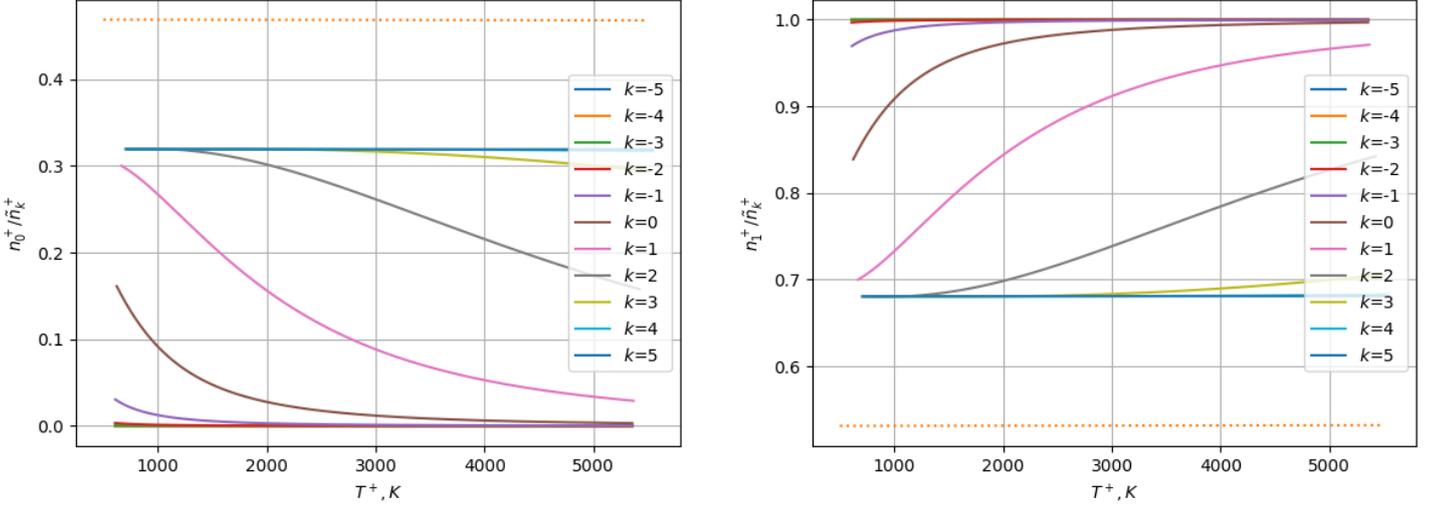


Рис. 8: Пунктиром - зависимость n_c^-/\tilde{n}_k^- от T^-

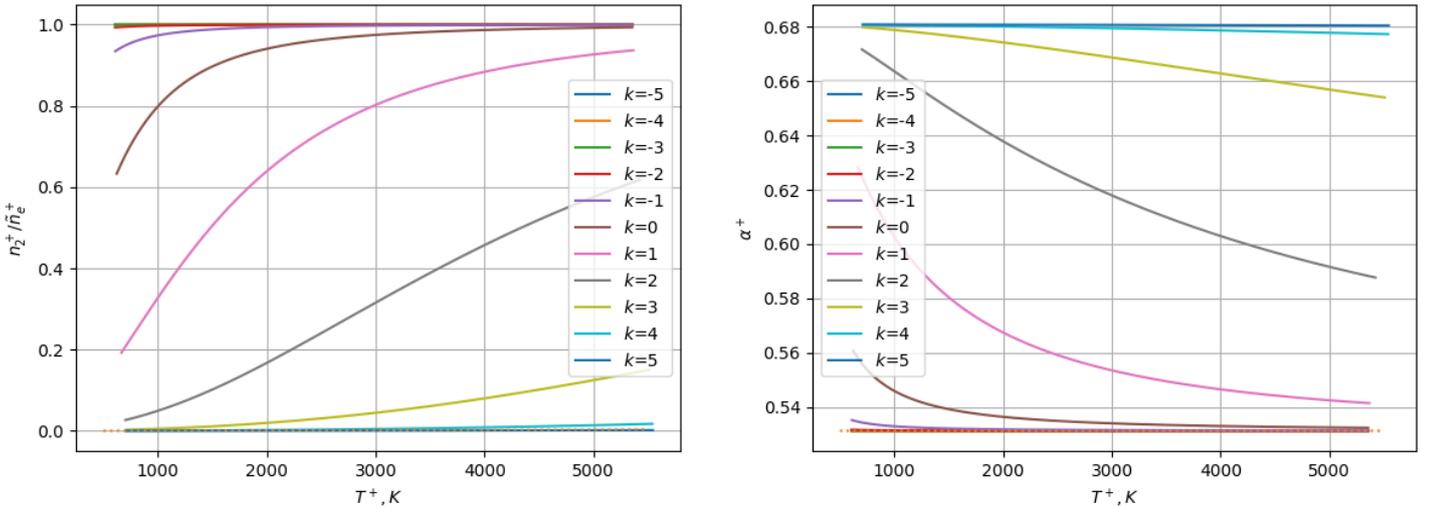


Рис. 9: Пунктиром - зависимость n_2^-/\tilde{n}_e^- и α^- от T^-

Из этих рис. замечаем, что есть некая средняя линия, соответствующая $k = 1$, с разных сторон от которой распределения тяжелых компонент меняет свой характер

– с уплотнением газа, относительный атомарный состав при повышении температуры все дольше сохраняет свое значение, затем уже идет ионизация (на графике это та область температур, где линии сливаются). И наоборот, чем разреженнее газ, тем быстрее электрон пытается оторваться от ядра. Уже при температурах от 1000 до 2000 K, за ПСУ атомы успевают распасться. Тем самым, разница относительных концентраций по обе стороны большая для разреженных и малая для плотных газов. Из графиков степени ионизации видно, что ее значение лежит в интервале от 0.53 до 0.68. Процесс остановки ионизации связан из-за допущений наложенных на межчастичные взаимодействия.

Отметим еще, что характер полученных картин (почти) не меняется с изменением скорости входного потока. Данный результат мы не будем приводить в виде рис., хотя они протестированы в процессе реализации программного кода.

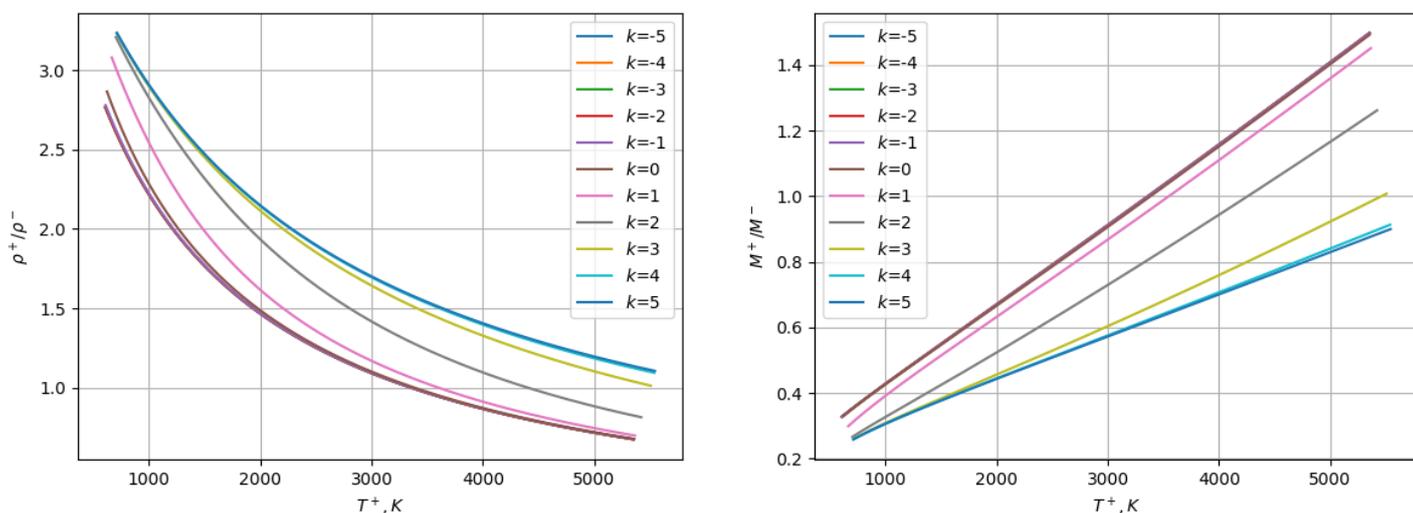


Рис. 10

На графике степени сжатия наблюдаем, что для разреженных газов сжатие падает от 2.7 до 1 и меньше (т.е. до нефизичной области) с увеличением температуры, а для плотных газов падает от 3 до 1.2 (прижимаясь к этому порогу). Аналогично просматривается зависимость между скоростями и плотностью газа. Большое отношение скоростей по разные стороны от ПСУ наблюдается для плотных газов и меньшее для разреженных. Само это убывание при повышении температуры медленнее для плотных и быстрее для разреженных. Это видно из угла наклона кривых.

Рис. ниже дает тоже интересные результаты. Сперва для $k = -5$ наибольшая степень сжатия, затем начиная от $k = -1$ до $k = -4$ значение этой величины убывает, затем эта величина еще больше падает до минимума уже от $k = 5$ до $k = 0$. Это можно заметить при близком рассмотрении графика зависимости плотности от температуры перед и за ПСУ. А в целом плотность газа убывает с ростом температуры.

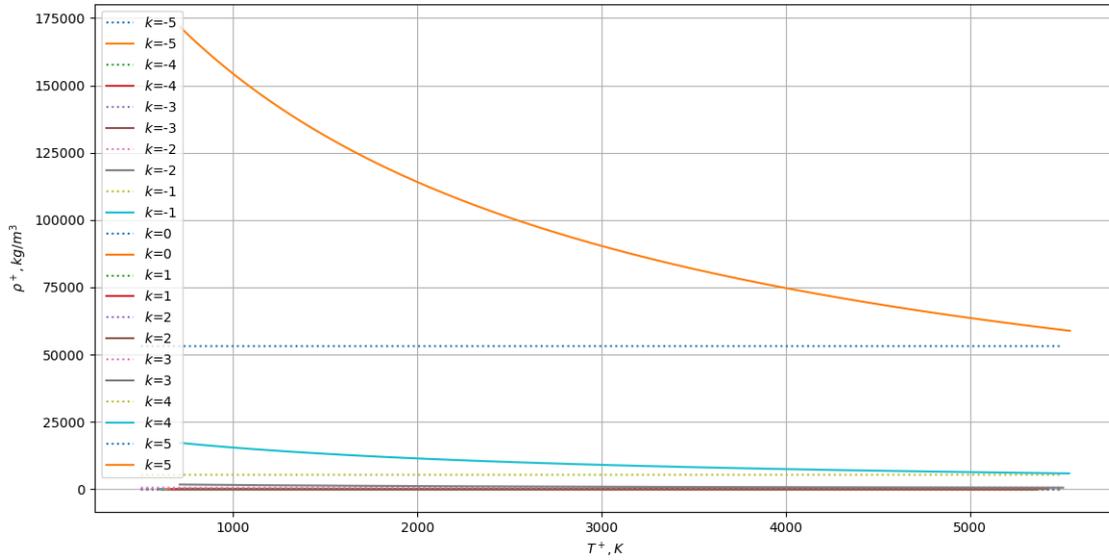


Рис. 11: Пунктиром - зависимость $\rho^-(T^-)$

Теперь посмотрим на график зависимости интенсивности скачка от давления на входе. Значение этой интенсивности для всех плотностей газов почти одинаковое - 4.5, но выполняются они все для разных значений давления на входе. Для изменения этого значения необходима огромная разница во входном давлении. Из рис. видно, что малому изменению по ординате соответствуют большие изменения по абсциссе. Для того, чтобы привести правую линию (ей соответствует наиболее плотное состояние) ближайшему положению, необходимо десятикратно уменьшить давление на входе. Аналогичные зависимости имеются между каждыми близлежащими линиями.

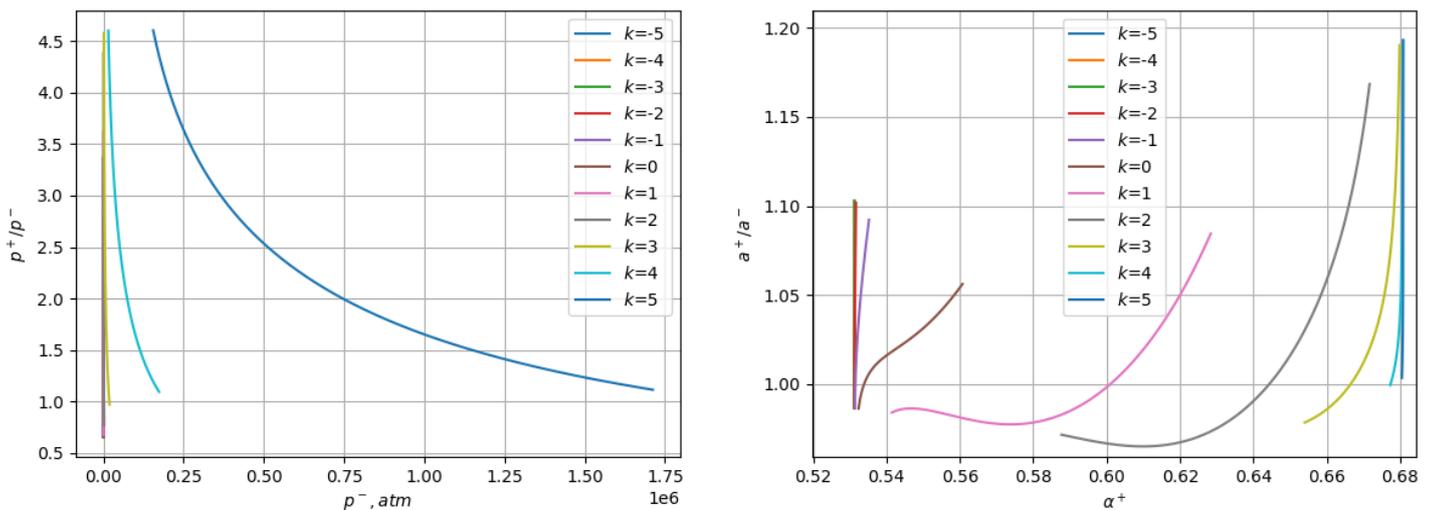


Рис. 12

Интересен и рис. показывающий отношение скоростей звука по разные стороны от

ПСУ в зависимости от степени ионизации. Видим, что для более разреженных и более плотных газов степень ионизации мало изменяется (порядка 0.001) во всем диапазоне изменения температуры. Значение этого изменения растет с повышением степени ионизации (но на малую величину). Есть и промежутки степени ионизации, для которых скорость звука за ПСУ сначала убывает по отношению к скорости звука перед ПСУ, а уже потом начинает расти.

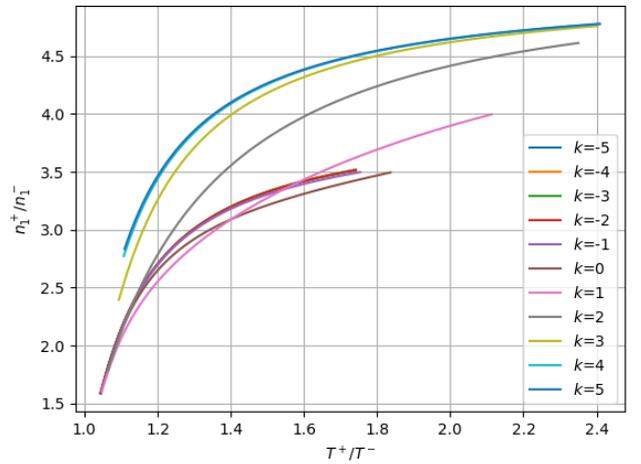
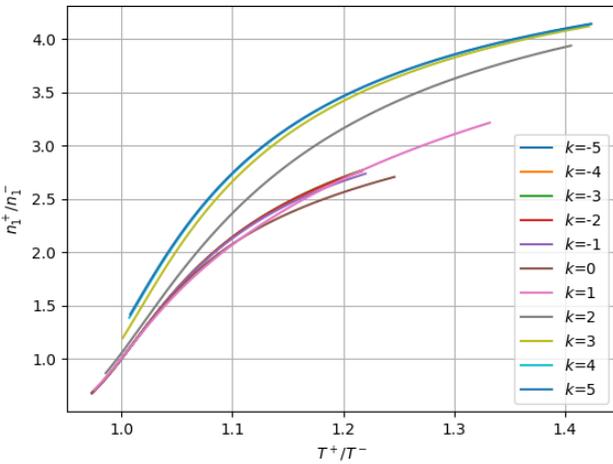
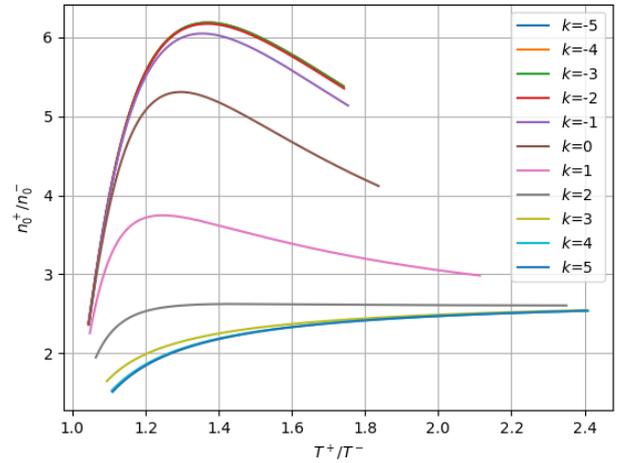
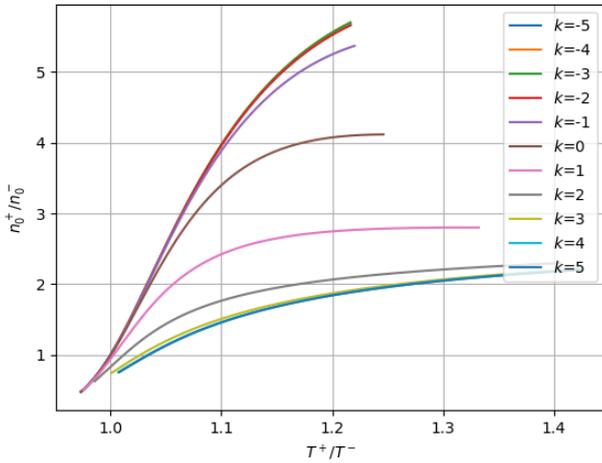
III. Теперь посмотрим как поведет себя газ, если мы поменяем и плотность и скорость газа. Возьмем в этот раз те же значения, что и в прошлом случае, но с тем изменением, что добавим еще одно значение для скорости потока:

$$\text{частицы: } n_0^- = 0.6N_L * 10^k, \quad n_1^- = 0.25N_L * 10^k, \quad n_2^- = 0.15N_L * 10^k,$$

$$\text{где } k = \{-5, -4, -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3, 4, 5\}$$

$$\text{скорости (m/s): } v^- = \{2500, 4500\}$$

$$\text{температуры из интервала (K): } T^- \in [500, 5500]$$



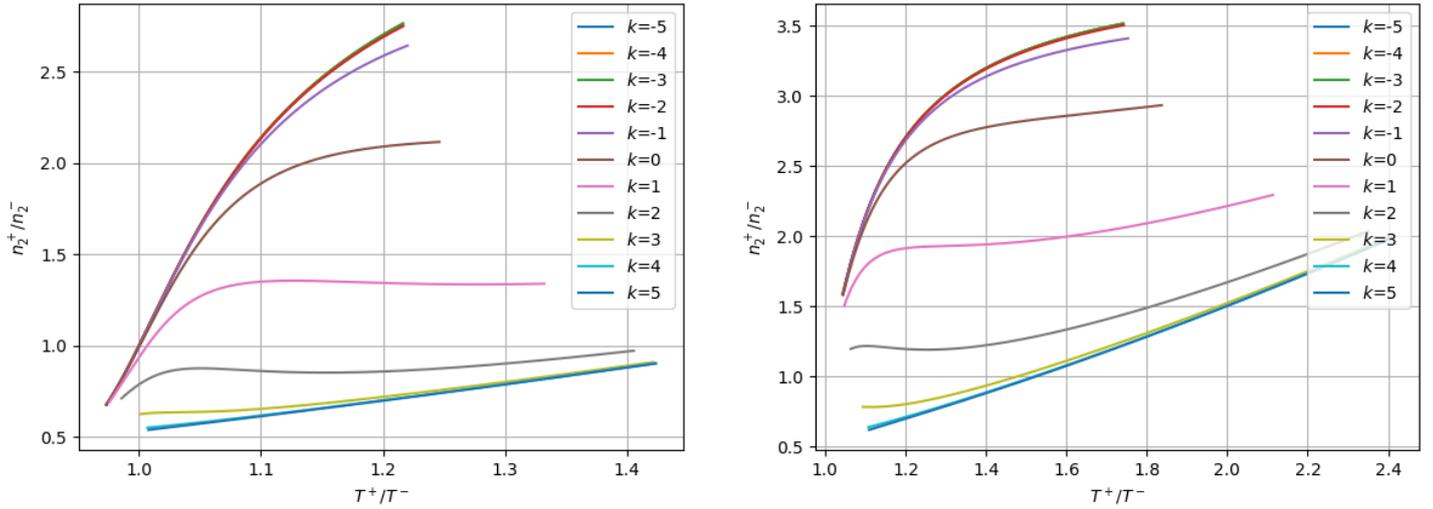


Рис. 13: Левые графики при $v^- = 2500, m/s$, а правые – при $v^- = 4500, m/s$

Интересны графики, характеризующие атомарные составы. Для разреженных газов наблюдается процесс нейтрализации, и только начиная с некоторых температур восстанавливается отрыв легких частиц. Видно, что чем больше сжимается газ, тем меньше рост отношений концентраций. Правые концы верхних линий, которые описывают разреженные газы, с ростом скорости все больше приближаются к предельному значению для нижних линий (порядка 3х единиц по оси ординат). А затем просто пересекает этот порог и убывает дальше (эти результаты тоже не стали приводить, но в программе это реализовано). И все же они не доходят до 1. Итак, получается, что для некоторых относительно малых скоростей потока в разреженных газах идут процессы нейтрализации, а с нагнетанием потока начинаются процессы ионизации.

Графики распределения ионов ведут себя так, что более плотные газы имеют большее изменение концентрации (примерно пятикратный рост) при переходе через ПСУ, а менее плотные - меньшее (для них в районе 3.5-4).

Характер изменения отношений концентраций электронов таков, что для разреженных газов увеличение скорости набегающего потока ведет к увеличению отношения до некоторого значения, затем это плато сохраняется в районе 4х (единиц по ординате), а для плотных газов это отношение растет с ростом скорости потока (видно, что и угол наклона увеличивается).

На этом завершим наш анализ.

5 Заключение

В работе исследуются сверхзвуковые течения одноатомного ионизирующегося газа с образованием ПСУ. Газ полагается идеальным в ТД смысле и считается, что в каждом бесконечно малом объеме установилось равновесие. Применяя основной принцип статистической физики о наиболее вероятном распределении, выводится одночастичная ФР при отсутствии полей. При выводе отмечается, что эти ФР не могут быть произвольными, а должны удовлетворять условиям нормировок. Затем, переходя в описании газа от ФР к статистическим суммам, удалось упростить эти нормировочные условия, и выяснилось, что такое описание упрощает и вычислительные соотношения и отмечалось, что эти условия нормировок при некоторых известных параметрах приводимы к одному алгебраическому уравнению.

Используя методы газовой динамики с привлечением КТ удалось несколько обобщить уравнения на ПСР, возникающие в сверхзвуковых потоках. Переходя в этих уравнениях от газодинамического истолкования параметров к кинетическим, удалось посчитать такие величины, как относительная концентрация нейтралов, ионов и электронов, давление, плотность, степень ионизации, степень сжатия, интенсивность скачка, скорость звука и число Маха при известных параметрах потока перед ПСУ.

Рассматривались три различных случая при задании параметров течения газа перед ПСУ. В первом случае полагалось, что скорость потока принимает некоторые конечные значения, а температура непрерывно меняется в некотором диапазоне. Затем выяснялось, как это повлияет на картину течения за ПСУ. Отмечалось, что при варьировании сразу двух параметров возможны нефизические случаи и объяснялось их природа. Полученные результаты подчинялись тем свойствам сжимающегося газа, которые излагаются в рамках газовой динамики высоких скоростей.

Во втором случае варьировалась плотность газа перед ПСУ при постоянной скорости набегающего потока и изменении температуры газа в том же пределе, что и в первом случае. Этот случай был примечателен тем, что появлялись некоторые срединные значения плотности газа. При изменении последних характер полученных результатов "как-будто" расщепляется на две части (относящиеся к сжатым и разреженным газам). Повышение или понижение плотности концентраций приводило к тому, что значения параметров течения за ПСУ изменялись в некотором "коридоре" значения, тяготее к тому, к какому типу приближается по своей плотности газ. И все они все-равно подчинялись законам сверхзвуковой газодинамики.

В третьем случае рассматривались смешанная постановка первых двух случаев: варьировалась как скорость набегающего потока, так и плотность газа. Скорости принимали два значения. Построены графики для отношений концентрации компонент газа по разные стороны от ПСУ и пояснились полученные результаты. В целом все они соответствуют свойствам теории ПСУ, точнее, при переходе через фронт скачка значения плотностей растут.

6 Список литературы

- [1] Климонтович Ю. Л. Статистическая теория электромагнитных процессов в плазме. М.: Изд-во МГУ, 1964. 282 с.
- [2] Mitchner M., Kruger C. H. J. Partially ionized gases. New York: J. Willey and Sons, 1973. 458 p.
- [3] Климонтович Ю. Л. Кинетическая теория электромагнитных процессов. М.: Наука, 1980. 374 с.
- [4] Golant V. E., Zilinskij A. P., Sacharov I. E. Fundamentals of plasma physics. New York: J. Willey and Sons, 1980. 528 p.
- [5] Жданов В. М. Явления переноса в многокомпонентной плазме. М.: Физ. мат. лит., 2009. 299 с.
- [6] Istomin V. A., Kustova E. V. Transport properties of five components nitrogen and oxygen ionized mixtures with electronic excitation // AIP Conference Proceedings. Vol. 1501. 2012. P. 168–174.
- [7] Самуйлов Е. В. О константе равновесия ионизации частиц // Теплофизика высоких температур, 1965. Т. 3, № 2. С. 216–222.
- [8] Шамбадаль П. Развитие и приложения понятия энтропии. М., 1967, 278 с.
- [9] Рыдалевская М. А. Статистические и кинетические модели в физико-химической газодинамике. СПб.: Изд-во С.-Петербур. ун-та, 2003. 248 с.
- [10] Рудой Ю. Г. Обобщенная информационная энтропия и неканоническое распределение в равновесной статистической механике, ТМФ, 2003, том 135, номер 1, 3–54
- [11] Энциклопедия низкотемпературной плазмы : Ввод. том, 2000., 634 с.
- [12] Овсянников Л.В. Лекции по основам газовой динамики : Учеб. пособие для мех.-мат. спец. ун-тов, Москва, Наука, 1981., 368 с.
- [13] Лунев В.В. Течение реальных газов с большими скоростями, Москва, Физматлит, 2007., 759 с.
- [14] Жданов В.М. Процессы переноса и релаксации в молекулярных газах, Москва, Наука, 1989., 335 с.
- [15] Кочин Н.Е., Кибель Н.А., Розе Н.В. Теоретическая гидромеханика. Т.2, Москва, 1963 г., 727 стр.

- [16] Нагнибеда Е.А., Кустова Е.В. Кинетическая теория процессов переноса и релаксации в потоках неравновесных реагирующих газов. СПб. Изд-во С.- Петерб. ун-та, 2003., 269 с.
- [17] Дж. Ферцигер, Г. Капер. Математическая теория процессов переноса в газах, с англ. Под ред. проф. Д. Н. Зубарева и А. Г. Башкирова, Москва, Мир, 1976., 554 с.
- [18] Валландер С.В., Нагнибеда Е.А., Рыдалевская М.А. Некоторые вопросы кинетической теории химически реагирующей смеси газов, Ленинград, Изд-во Ленингр. ун-та, 1977., 280 с.
- [19] Жданов В.М. Процессы переноса в многокомпонентной плазме, Москва, Физматлит, 2009., 277 с.
- [20] М.А.Rydalevskaya. Simplified method for calculation of equilibrium plasma composition, Volume 476, 15 June 2017, Pages 49-57
- [21] Богатко В. И., Потехина Е. А. К задаче моделирования течений газа за фронтом сильной ударной волны с помощью эффективного показателя адиабаты, Вестник Санкт-Петербургского университета. Математика. Механика. Астрономия. 2020. Т. 7 (65). Вып. 1. С. 104–111.
- [22] Рыдалевская М.А., Романова М.С. Определение равновесного состава ионизованных одноатомных газов, Вест.СПбГУ. 2013. Вып. 4. С. 108-116.
- [23] Коган М.Н. Динамика разреженного газа, Москва, Наука, 1967, 440 с.
- [24] Ельяшевич М.А. Атомная и молекулярная спектроскопия., 5-е изд., Москва, ЛИБРОКОМ, 2008., 527 с.
- [25] Зельдович Я.Б. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений., 2-е изд., Москва , Наука, 1966., 686 с.
- [26] Леванов А.В., Антипенко Э.Е. Введение в химическую кинетику. Москва, 2006, 44с.
- [27] Аржаников Н.С. Аэродинамика летательных аппаратов, Москва, Высш. шк., 1983., 659 с.
- [28] Электронный ресурс. Режим доступа: <https://www.nist.gov/pml/atomic-spectra-database>