

03

О природе неравновесного излучения молекул иода во фронте ударной волны

© А.В. Емельянов,¹ А.В. Еремин,¹ С.В. Куликов²

¹ Объединенный институт высоких температур РАН,
125412 Москва

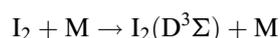
² Институт проблем химической физики РАН,
142432 Черноголовка, Московская область, Россия
e-mail: kuls@icp.ac.ru

(Поступило в Редакцию 23 апреля 2012 г.)

Метод Монте-Карло нестационарного статистического моделирования (или direct simulation Monte Carlo (DSMC) в англоязычной литературе) был применен при моделировании задачи о фронте ударной волны в смеси 0.7%I₂–99.3%He для числа Маха ударной волны 4.85. Выбор данной системы был обусловлен тем, что именно в таких системах экспериментально наблюдались интенсивные пики излучения и были приведены убедительные доказательства того, что эффект обусловлен сверхравновесными высокоэнергетичными столкновениями молекул I₂ между собой. Полученные результаты моделирования дают дополнительные веские аргументы в пользу того, что поступательная неравновесность во фронте ударной волны в легком газе, содержащем малую примесь тяжелых не реагирующих молекул, может вызывать наблюдаемый экспериментально эффект возникновения пиков неравновесного излучения.

Введение

В работе [1] экспериментально исследованы пики неравновесного УФ-излучения малой примеси молекул иода во фронте ударных волн (УВ), распространяющихся в различных инертных газах (Ar, Ne, He) и водороде при равновесных температурах от 1300 до 2500 К. Анализ полученных данных, проведенный авторами [1] с привлечением приближенного решения уравнения Больцмана методом Тамма–Мотт–Смита, подтвердил, что наблюдаемое явление может быть вызвано сильными неадиабатическими соударениями



с передачей более 5 eV в зоне поступательной неравновесности УВ.

Таким образом, экспериментальные результаты работы [1] можно рассматривать как одно из немногих непосредственных наблюдений эффекта неравновесного возбуждения молекул в однократных высокоэнергетических соударениях при перестройке функции распределения молекул по скоростям во фронте УВ.

Следует отметить, что проблема неравновесных явлений во фронте УВ имеет давнюю историю. Уже в первых исследованиях на ударных трубах [2] экспериментаторами регистрировались пики излучения и концентрации электронов во фронте УВ даже весьма слабой интенсивности с числами Маха 3–4. Было отмечено, что наиболее сильно эти явления проявляются в УВ для случая легких газов, содержащих малые примеси тяжелых реагирующих молекул.

Рядом различных исследователей высказывалась идея, что именно в газе, содержащем малую тяжелую добавку, может возникнуть во фронте сильная поступательная

неравновесность, которая, возможно, и приводит к подобным эффектам.

Научный интерес к проблеме неравновесных явлений во фронте УВ обусловлен возможной перспективностью использования эффектов поступательной неравновесности для практических приложений, прежде всего — для управления воспламенением и детонацией за УВ в горючих смесях.

В 1979 г. Зельдович с соавторами [3] сформулировали физические предпосылки возникновения сильного эффекта поступательной неравновесности во фронте УВ для смесей, состоящих из основного легкого газа и двух тяжелых примесей, заметно отличающиеся по молекулярной массе между собой. Эта идея усилила популярность высказываемых ранее гипотез. Позднее идея Зельдовича была подтверждена путем численного моделирования [4,5] и экспериментально [6].

Однако в силу чрезвычайной сложности разрешения зоны поступательной релаксации, составляющей в условиях обычного ударно-волнового эксперимента менее 0.1 мм, большинство экспериментальных наблюдений являлось в той или иной мере косвенными [7–10].

Более того, в ряде недавних работ было убедительно показано, что механизм обсуждаемых неравновесных эффектов в УВ в большинстве случаев вовсе не связан с высокоэнергетичными соударениями во фронте, а обусловлен вторичными экзотермическими процессами конденсации продуктов распада тяжелых молекул [11–13]. При этом авторы итоговой работы [13] не отрицали возможность существования явления в принципе, а только призывали к более аккуратной постановке эксперимента и тщательному анализу происходящих процессов. В этом плане постановка экспериментов в работе [1] и полученные там результаты представляются наиболее

достоверными как с точки зрения отсутствия вторичных экзотермических процессов, так и по временным профилям наблюдаемых пиков излучения.

Отметим, что трудность экспериментального наблюдения неравновесных явлений в зоне поступательной неравновесности и сложность анализа регистрируемых сигналов из-за широкого разнообразия происходящих процессов стимулировали развитие различных теоретических подходов к этой проблеме. Поэтому наряду с экспериментами активно развивались аналитические и расчетные методы исследования неравновесных распределений по энергиям парных столкновений молекул во фронте ударной волны в смеси газов со значительно различными молярными массами [1,4,5,7,14,15].

В частности, в ряде работ [1,15] развит подход, основанный на приближенном решении системы уравнений Больцмана. До последнего десятилетия, в течение которого произошел резкий рост мощностей компьютерной техники, этот метод предоставлял наилучшие возможности для анализа процесса трансформации функции распределения молекул по скоростям во фронте ударной волны. Следует отметить, однако, что применение приближенного решения уравнения Больцмана в виде суперпозиции нескольких максвеллианов для нахождения функций распределения в зоне поступательной неравновесности является априорно грубым приближением, причем погрешности данного подхода особенно резко возрастают при расчете дальних высокоэнергетических хвостов функции распределения, являющихся существенно немаксвелловскими.

Поэтому другим подходом к решению этой задачи, получившим активное развитие к настоящему времени, является предложенный Бердом [16] метод Монте-Карло нестационарного статистического моделирования (ММКНСМ) [4,5,7,14] (или *direct simulation Monte Carlo (DSMC)* в англоязычной литературе), позволяющий избежать очень трудоемкого решения уравнения Больцмана и предоставляющий наиболее полную и достоверную информацию. Идея метода состоит в моделировании на ЭВМ реального течения разреженного газа с помощью большого количества (до 10^7) модельных частиц, каждая из которых представляет собой очень большое число реальных молекул. Непрерывный процесс движения молекул и их столкновений расщепляется на два последовательных этапа на каждом малом временном шаге Δt . Метод не имеет принципиальных ограничений по ширине спектра энергий столкновений, однако с ростом энергий рассматриваемых реакций резко возрастает вычислительная сложность задачи. Лишь относительно недавно развитие вычислительной техники предоставило возможность получения распределений столкновений по энергиям до 4–5 eV и выше.

В настоящей работе ММКНСМ был применен для анализа возрастания интенсивности частот высокоэнергетических соударений во фронте УВ в смеси в условиях экспериментов работы [1]. Как отмечалось выше, выбор данной системы был обусловлен тем, что именно в таких

системах наблюдались интенсивные пики излучения и были приведены убедительные доказательства того, что эффект обусловлен возникающей во фронте поступательной неравновесностью, а именно высокоэнергетичными неадиабатическими столкновениями молекул I_2 с газом-разбавителем или между собой [1,17].

Полученные в настоящей работе численные результаты позволили заключить, что в рассматриваемом случае эффекты поступательной неравновесности во фронте несомненно могут вызывать наблюдаемый экспериментально эффект возникновения пиков неравновесного излучения.

Эксперимент

Детали экспериментов подробно описаны в [1,17], поэтому здесь приведем лишь основные параметры проведенных измерений, существенные для последующего численного анализа.

Были исследованы падающие ударные волны в инертных газах (He, Ne, Ar) и водороде, содержащих малую примесь (от 0.1 до 3%) молекул иода. В экспериментах регистрировались кратковременные пики неравновесного излучения перехода $I_2 (D^3\Sigma \rightarrow V^3\Pi)$ в области 340 nm. Верхний уровень излучающего состояния $D^3\Sigma$ имеет энергию порядка 5 eV, что существенно выше порога диссоциации молекул иода (1.54 eV). Поэтому его заселение путем последовательного возбуждения колебательных уровней в „слабых“ соударениях исключено, и единственным механизмом, ответственным за появление неравновесного излучения в районе 340 nm в зоне поступательной неравновесности, являлись „сильные“ неадиабатические соударения. Измерение интенсивности спонтанного излучения молекул иода проводилось с использованием длиннофокусной оптической системы, обеспечивающей пространственное разрешение в ударной трубе ≤ 1 mm. Временное разрешение регистрирующей аппаратуры не превышало 0.1 μ s.

Были зарегистрированы резкие пики излучения, интенсивность которых в ряде случаев на несколько порядков превышала равновесное излучение за фронтом ударной волны. Характерное время нарастания излучения в пиках составляло не более 0.2–0.5 μ s, а времена спада излучения колебались в пределах от 0.5 до 2 μ s.

На рис. 1 приведен пример пиков излучения в области 320–340 nm, зарегистрированных в различных газах, содержащих примерно 1% I_2 при близких параметрах УВ. Хорошо видно существенное увеличение амплитуды сигналов при снижении молекулярного веса несущего газа. Аккуратный анализ абсолютной интенсивности измеренных сигналов в максимуме, проведенный с учетом фотонной чувствительности ФЭУ и апертуры измерений, позволил определить, что максимальная концентрация излучающих молекул в пике в условиях, приведенных на рис. 1, была порядка 3000 (± 1000) cm^{-3} в H_2 , 1000 (± 500) cm^{-3} в He, 200 (± 100) cm^{-3} в Ne и

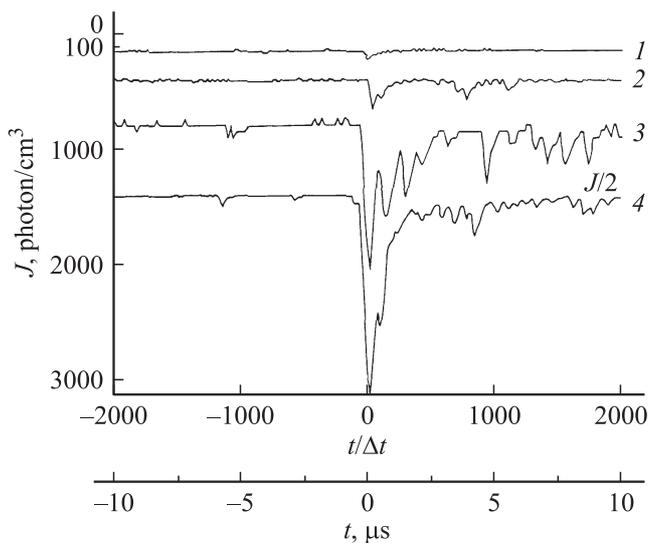


Рис. 1. Осциллограммы эмиссионных сигналов в области $\lambda = 320\text{--}340\text{ nm}$ в смесях, содержащих около 1% I_2 в различных газах при равновесных температурах за ударной волной $T_2 = 2100 \pm 100\text{ K}$; Δt — время между соударениями $\text{I}_2 + \text{M}$; М: 1 — Ar, 2 — Ne, 3 — He, 4 — H_2 (сигнал в водороду уменьшен вдвое). Вертикальная шкала отражает абсолютную интенсивность излучения, выраженную в концентрациях фотонов в cm^3 .

около $50 (\pm 30)\text{ cm}^{-3}$ в Ar. В дальнейшем для численного анализа были использованы результаты измерений, проведенных в Ne.

Методика и результаты моделирования

Полученные экспериментальные результаты послужили основой для численного моделирования неравновесных эффектов, сопровождающих трансформацию функции распределения молекул по скоростям во фронте УВ в Ne, содержащем малую примесь молекул I_2 .

Моделирование было выполнено в одномерном пространстве координат и трехмерном пространстве скоростей. Применялся ММКНСМ с постоянными весовыми множителями. Детали моделирования стационарной УВ в системе координат, связанной с фронтом, приведены в [4,5,7,14]. Но для большей определенности изложения и удобства читателей алгоритм приведен ниже.

Моделируемая среда заменялась системой модельных частиц. В первый момент времени в соответствии с начальными условиями данные частицы имели заданные скорости и были распределены по ячейкам, на которые разбито исследуемое пространство координат. Полагалось, что столкновения парные и могут происходить с определенной вероятностью только между частицами, находящимися в одной ячейке.

Процесс эволюции рассматриваемой системы за интервал времени Δt расщепляется на два этапа: 1) только перемещение частиц с неизменными скоростями

(этап А), 2) только изменение скоростей частиц в результате их столкновений (этап В).

Обозначенная как $A_l^{(i)}$ i -я модельная частица сорта l характеризовалась массой m_l , скоростью $\mathbf{c}_l^{(i)}$ ($u_l^{(i)}, v_l^{(i)}, w_l^{(i)}$), расположением в потоке $x_l^{(i)}$ и весовым множителем η_l . Этот весовой множитель показывает число реальных молекул, представляемых данной модельной частицей. Таким образом, концентрация реальных молекул в ячейке j , имеющей объем V_j , дается следующим выражением

$$n_l^{(j)} = \sum \eta_l^{(i)} / V_j.$$

Моделирование этапа А очень простое. В результате этого моделирования новое расположение модельной частицы $A_l^{(i)}$ в потоке

$$x_l^{(i)*} = x_l^{(i)} + u_l^{(i)} \Delta t.$$

Используемым параметром столкновений являлось интегральное сечение упругого столкновения σ_{lm}^{ik} между молекулами $A_l^{(i)}$ и $A_m^{(k)}$.

Следующие обозначения были использованы ниже

$$\vartheta_{lm} = \max\{\eta_l, \eta_m\}, \quad \theta_{lm} = \min\{\eta_l, \eta_m\}.$$

Здесь далее индексы номеров частиц и ячеек, где можно, для простоты опускаются.

На этапе В эволюция системы моделировалась в несколько (k) шагов. На каждом из этих шагов взаимодействие пар частиц в рассматриваемой ячейке происходило в течение момента времени $\Delta t_* = \Delta t/k$. Моделирование каждого такого шага проводилось по урновой схеме испытаний. Для этого все пары частиц в ячейке разбивались на совокупности, характеризующиеся сортами частиц, образующих пары; например, пары из частиц сорта 1, пары из частиц сортов 1 и 2, и т.д. Из каждой совокупности равновероятно выбирается только одна пара частиц, например A_l и A_m . Эволюция состояния выбранной пары частиц моделировалась по схеме, представленной ниже.

Шаг 1. Взаимодействие частиц A_l и A_m разыгрывалось с вероятностью

$$Q_{lm} = K_{lm} \vartheta_{lm} \sigma_{lm} g_{lm} \Delta t_* / V.$$

Здесь K_{lm} — число пар частиц в рассматриваемой совокупности. Число k выбиралось так, чтобы Q_{lm} было немного меньше единицы. Если результат испытания отрицательный, то следующий шаг для данной пары частиц не выполняется.

Шаг 2. Скорости частиц A_l и A_m заменялись на \mathbf{c}_l^* и \mathbf{c}_m^* с вероятностями θ_{lm}/η_l и θ_{lm}/η_m соответственно.

Это так называемая усовершенствованная урновая схема испытаний для моделирования этапа столкновений.

Отрезок прямой, представляющий область моделирования, разбивался на ячейки равной длины Δx . На границах области моделирования функции распределения

скоростей полагались максвелловскими в соответствии с температурами перед и за ударной волной.

В начальный момент времени ударная волна задавалась в виде поверхности разрыва для наиболее легкого компонента. Для тяжелого компонента поверхность разрыва заменялась переходной областью с монотонным линейным изменением параметров. Отношения средних чисел модельных частиц каждого компонента в ячейке перед и за поверхностью разрыва или переходной областью (N_a и N_b соответственно) определялись из условия на разрыве

$$N_a W_a = N_b W_b,$$

где W_a и W_b — скорости потока перед и за УВ. В каждой из областей отрезка прямой как перед, так и за поверхностью разрыва начальные весовые множители для частиц каждого сорта полагались равными друг другу. А их величины были выбраны так, что каждый компонент был представлен примерно одним и тем же числом модельных частиц.

При эволюции системы во времени частицы, пересекающие границы области моделирования, исключались из рассмотрения. А с целью компенсации этих потерь задавались потоки новых частиц вовнутрь области моделирования. Для ряда компонентов, за исключением одного, скорости вводимых частиц задавались случайным способом в соответствии с равновесными функциями распределения перед и за фронтом. Причина этого исключения в том, что граничные условия, соответствующие гипотезе о молекулярном хаосе и термодинамическому равновесию, не позволяют в численных экспериментах получить строго стационарную УВ. Последняя будет медленно смещаться к какой-либо границе. При таких естественных граничных условиях данное поведение волны является, по-видимому, специфической особенностью рассматриваемой задачи. Оно объясняется отклонением потоков вещества, импульса и энергии через границы от их теоретических значений на бесконечности, вероятно, в силу статистических флуктуаций из-за недостаточно большого числа модельных частиц и размера области моделирования. Для стабилизации положения фронта волны использовалась процедура регулирования вводимого в модельную область числа частиц какого-либо сорта с целью лучшего приближения количества вещества $Z_{\phi 1}$, продольного импульса $Z_{\phi 2}$, продольной $Z_{\phi 3}$ и поперечной энергий $Z_{\phi 4}$, перенесенных частицами рассматриваемого сорта за время t через левую ($\phi = a$) или правую ($\phi = b$) границы к соответствующим теоретическим значениям на бесконечностях. В данной процедуре используются функции μ_ϕ , построенные так, чтобы в них входили статистически равноправные комбинации $Z_{\phi r}$ ($r = 1-5$) и $\mu_\phi \rightarrow 0$ при $t \rightarrow \infty$ для заданных условий на границах. Для этого используются математические ожидания $Z_{\phi r}$, т.е. $E_{\phi r} = E_{\phi r}(Z_{\phi r})$ и их дисперсии $D_{\phi r} = D_{\phi r}(Z_{\phi r})$, соответствующие условиям на границах.

При вычислении $E_{\phi r}$ и $D_{\phi r}$ полагалось, что величины количества модельных частиц, пересекающих границу в положительном или отрицательном направлениях за время t , распределены по закону Пуассона. Также предполагалось, что потоки на границах области моделирования удовлетворяют следующим условиям:

- а) безградиентность течения возле границы,
- б) справедливость гипотезы о молекулярном хаосе,
- в) статистическая независимость η_m и c_m ,
- г) справедливость в среднем следующих соотношений для η_m модельных частиц, покидающих $\langle \eta_m \rangle$ контрольный объем или вновь в него поступающих $\langle \eta_m \rangle$

$$\langle \eta_m^+ \rangle = \langle \eta_m^- \rangle = \langle \eta_m \rangle, \quad \langle (\eta_m^+)^2 \rangle = \langle (\eta_m^-)^2 \rangle = \langle \eta_m^2 \rangle.$$

Расчеты приводят к следующим результатам:

$$E_{\phi 1} = m \langle \eta_m \rangle t W_\phi N_\phi / \Delta x,$$

$$E_{\phi 2} = m \langle \eta_m \rangle t (W_\phi^2 + \Phi_\phi) N_\phi / \Delta x,$$

$$E_{\phi 3} = (m/2) \langle \eta_m \rangle t W_\phi (W_\phi^2 + 3\Phi_\phi) N_\phi / \Delta x,$$

$$E_{\phi 4} = 2\Phi_\phi E_{\phi 1},$$

$$D_{\phi 1} = m^2 \langle \eta_m^2 \rangle t (2\Phi_\phi)^{1/2}$$

$$\times [\exp(-S_\phi^2) / \pi^{1/2} + S_\phi \operatorname{erf}(S_\phi)] N_\phi / \Delta x,$$

$$D_{\phi 2} = m^2 \langle \eta_m^2 \rangle t (2\Phi_\phi)^{3/2} [(1 + S_\phi^2) \exp(-S_\phi^2) / \pi^{1/2}$$

$$+ S_\phi (1.5 + S_\phi^2) \operatorname{erf}(S_\phi)] N_\phi / \Delta x,$$

$$D_{\phi 3} = (m^2/4) \langle \eta_m^2 \rangle t (2\Phi_\phi)^{5/2} [(2 + 4.5S_\phi^2 + S_\phi^4)$$

$$\times \exp(-S_\phi^2) / \pi^{1/2} + S_\phi (3.75$$

$$+ 5S_\phi^2 + S_\phi^4) \operatorname{erf}(S_\phi)] N_\phi / \Delta x,$$

$$D_{\phi 4} = \Phi_\phi 8\Phi_\phi^2 D_{\phi 3}.$$

Здесь

$$\Phi_\phi = kT_\phi / m, \quad S_\phi = W_\phi / (2\Phi_\phi)^{1/2},$$

$$\operatorname{erf}(x) = (2/\pi^{1/2}) \int_0^x \exp(-y^2) dy.$$

Функция μ_ϕ имела вид

$$\mu_\phi = \Sigma b_{\phi r}^2 [(Z_{\phi r} - E_{\phi r}) / E_{\phi r}]^2.$$

Здесь $b_{\phi 1} = 1$, $b_{\phi r} = (E_{\phi r} / E_{\phi 1})^2 D_{\phi 1} / D_{\phi r}$, $r = 2, 3, 4$. Данная процедура выполняется после этапа перемещений (этап А) и состоит в том, что ввод частиц через границу продолжается до тех пор, пока поступающие частицы, имеющие скорости, разыгранные в соответствии с граничными условиями, уменьшают значения μ_ϕ . В случае смесей эта процедура применялась, как правило, к компоненту, имевшему наибольшую концентрацию молекул. Во всех рассматриваемых ниже вариантах моделирования она обеспечивала практически

неподвижное положение волны в течение некоторого времени счета. Поэтому после некоторого числа этапов перемещений и столкновений возобновлялось предварительно запомненное распределение частиц в модельном пространстве и по скоростям. В упомянутом ниже моделировании это число полагалось 40.

Выборка параметров потока при накоплении статистических результатов проводилась после установления стационара через промежутки времени $\Delta x/W_b$.

Молекулы в расчете рассматривались как абсолютно упругие твердые сферы без внутренних степеней свободы. Пренебрежение внутренними степенями свободы I_2 во многом оправдано, так как концентрация I_2 мала, и возбуждение колебаний не успевает произойти за время перестройки функции распределения поступательных скоростей [18]. Отношение диаметров молекул I_2 и He полагалось 2.08. Среднее число модельных частиц каждого компонента в ячейке перед фронтом составляло 12 000, $\Delta t = 0.05$. Функции распределения частиц по скоростям на границах области моделирования полагались максвелловскими в соответствии с температурой перед и за УВ. Был реализован мелкозернистый параллелизм [19] на 8 процессорах ЭВМ MVS100K Межведомственного суперкомпьютерного центра.

Результатом расчета являлись профили макропараметров среды вдоль оси потока и распределения парных соударений по относительным скоростям для пар частиц в различных точках фронта УВ. На рис. 2 показаны профили относительных концентраций $n_i^o = (n_i - n_{ia}) / (n_{ib} - n_{ia})$ и относительных кинетических температур $T_i^o = (T_i - T_a) / (T_b - T_a)$ (индексы a и b относятся соответственно к параметрам среды перед и за УВ). Расстояние нормировано на среднюю длину свободного пробега в смеси перед волной λ . Размер пространственной ячейки составлял $\Delta x = 0.15\lambda$.

Полученные при моделировании распределения по относительным скоростям для пар частиц, состоящих из одного атома He и одной молекулы I_2 (G_{LH}), представлены на рис. 3, а для пар из молекул I_2 (G_{HH}) — на рис. 4. Относительные скорости (g) здесь нормированы на среднюю скорость звука в смеси перед фронтом (a). Распределения по скоростям нормированы так, что их интегралы по всему пространству относительных скоростей равны 1.

Как видно из рис. 3, распределения G_{LH} в области высоких энергий не превышают во фронте сколько-либо заметного значения равновесного G_{LH} за волной, и столкновения I_2 -He не могут вызвать наблюдаемый эффект. Распределения G_{HH} , напротив, в узкой зоне фронта при больших энергиях значительно превышают (вплоть до 10^4 раз) свои равновесные значения за волной (рис. 4). Но этого недостаточно. Как показано в [13], высокоэнергетические хвосты G_{HH} , образуются во фронте в результате столкновений тяжелых и легких молекул. Столкновения I_2 - I_2 при больших E просто могут не успеть реализоваться в фронте за короткое время существования сверхравновесного „перехлеста“ G_{HH} . Но их

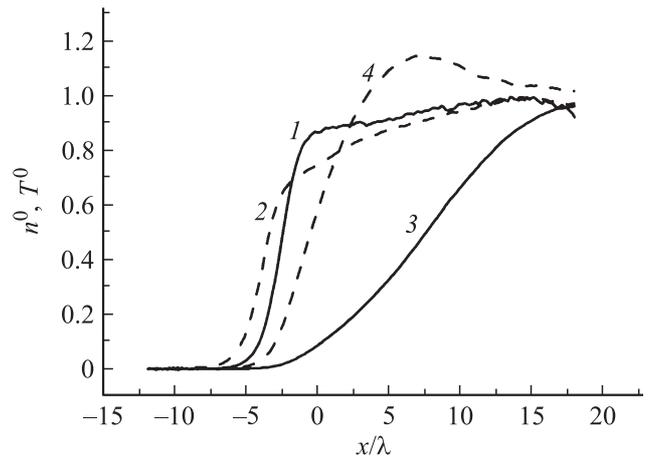


Рис. 2. Профили относительных концентраций n_i^o и относительных кинетических температур T_i^o : 1 — n_i^o для He; 2 — T_i^o для He; 3 — n_i^o для I_2 ; 4 — T_i^o для I_2 .

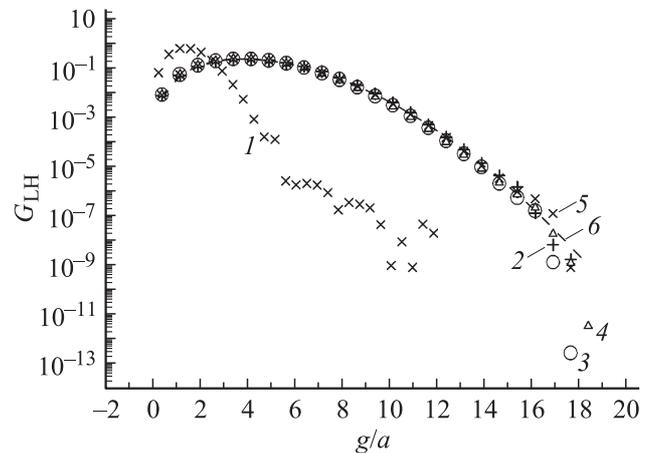


Рис. 3. Распределения относительных скоростей пар (G_{LH}) из молекул He и I_2 : 1 — в точке $x = -11.475$, 2 — -1.575 , 3 — 2.925 , 4 — 5.925 , 5 — 17.325 , 6 — равновесное G_{LH} за фронтом.

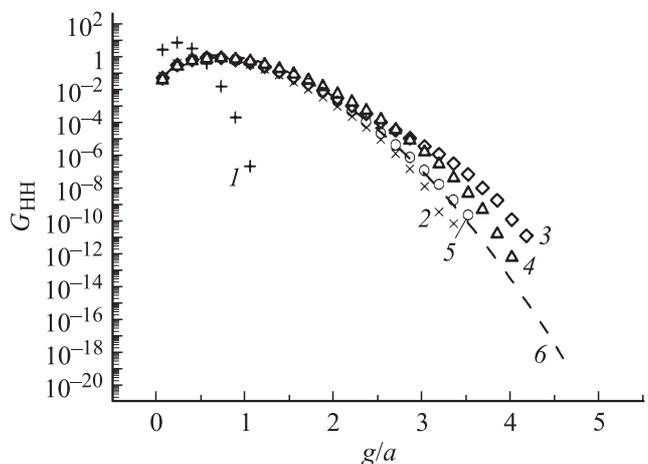


Рис. 4. Распределения относительных скоростей пар молекул (G_{HH}) I_2 : 1 — в точке $x = -11.475$, 2 — 1.425 , 3 — 2.925 , 4 — 8.925 , 5 — 17.325 , 6 — равновесное G_{HH} за фронтом.

удалось зафиксировать при численном моделировании. Следует отметить, что около правой границы области моделирования ($x = 17.325$) распределение G_{HH} очень близко к равновесному максвелловскому за фронтом, несмотря на отклонения от него во фронте.

Результаты моделирования показали, что существенное увеличение числа молекул I_2 , имеющих высокие кинетические энергии, приводит к соударениям между молекулами I_2 с энергиями относительного движения $E > 5.5$ (при этом $g/a = 3.4$). А этой энергии достаточно, чтобы забросить молекулу I_2 на уровень $D^3\Sigma$ с дальнейшим переходом на $B^3\Pi$ [1,17]. Если считать, что все столкновения с энергией, равной или больше E^* , переводят одну из молекул на уровень $D^3\Sigma$, то концентрация таких высокоэнергетических молекул при давлении смеси перед фронтом УВ 0.013 атм (как в эксперименте [1,17]) равна 3500 ± 400 частиц/см³. Наблюдаемая экспериментально максимальная концентрация фотонов в пике излучения, соответствующая концентрации данных высокоэнергетических молекул I_2 , составляет примерно 500–1500 частиц/см³, как упоминалось выше. Это вполне согласуется с результатами проведенного моделирования с учетом того, что не все столкновения приводят к переходу молекулы I_2 в состояние $D^3\Sigma$. Оценки вероятности такого перехода по модели Ландау–Зинера дают для пороговой энергии величину около 10^{-4} , но при увеличении энергии соударения выше порога она резко (практически экспоненциально) увеличивается (см. аналогичные вычисления в [20]). Это важно с учетом того, что в численном эксперименте были зафиксированы столкновения с заметно большей энергией, чем пороговая, а именно 6.5 эВ (при этом $g/a = 3.8$). К сожалению, более точные расчеты вероятности возбуждения очень сложны и требуют знания потенциальных поверхностей I_2-I_2 .

Пришлось отказаться от моделирования с другими газами разбавителями при различных числах Маха УВ и ограничиться случаем наиболее яркого проявления неравновесного излучения в эксперименте. Это обусловлено тем, что подобное моделирование требует очень больших затрат машинного времени (около 1500 h или полгода счета даже на такой мощной ЭВМ, как MVS100K).

Заключение

Таким образом, результаты моделирования показывают, что высокоэнергетические столкновения I_2-I_2 во фронте волны, обусловленные поступательной неравновесностью, могут быть причиной возникновения наблюдаемых в [1,17] неравновесных явлений. Это является дополнительным важным аргументом в пользу того, что, как и объяснено в [1,17], эффект обусловлен возникающей во фронте УВ поступательной неравновесностью. Рассматриваемый эксперимент один из немногих, когда такой вывод не вызывает сомнения.

Авторы благодарят О.Н. Терновую за помощь в обработке результатов моделирования.

Работа выполнена при поддержке Программы президента РАН № 14.

Список литературы

- [1] *Великодный В.Ю., Емельянов А.В., Еремин А.В.* // ЖТФ. 1999. Т. 69. Вып. 10. С. 23–33.
- [2] *Ударные трубы* / Под ред. Х.А. Рахматуллина и С.С. Семенова. М.: Изд-во иностранной литературы, 1962. 700 с.
- [3] *Зельдович Я.Б., Генич А.П., Манелис Г.Б.* // ДАН СССР. 1979. Т. 248. № 2. С. 349–351.
- [4] *Куликов С.В.* // Мех. жид. и газа. Изв. АН. 1997. № 4. С. 173–180.
- [5] *Kulikov S.V.* // Shock Waves. 1997. Vol. 7. N 1. P. 25–28.
- [6] *Куликов С.В., Манелис Г.Б.* // Докл. АН. 2002. Т. 382. № 5. С. 641–644.
- [7] *Genich A.P., Kulikov S.V., Manelis G.B., Chereshnev S.L.* // Sov. Tech. Rev. B. Therm. Phys. 1992. Vol. 4. Pt. 1. P. 1–69.
- [8] *Ахмадов У.С., Заслонко И.С., Смирнов В.Н.* // Хим. физика. 1989. Т. 8. № 10. С. 1400–1407.
- [9] *Козлов П.В., Лосев С.А., Романенко Ю.В.* // Письма в ЖТФ. 2000. Т. 26. Вып. 22. С. 69–75.
- [10] *Диваков О.Г., Еремин А.В., Зиборов В.С., Фортон В.Е.* // Докл. АН. 2000. Т. 373. Вып. 4. С. 141–145.
- [11] *Дракон А.В., Емельянов А.В., Еремин А.В.* // ЖТФ. 2008. Т. 78. Вып. 8. С. 64–70.
- [12] *Drakon A.V., Emelianov A.V., Eremin A.V.* // J. Phys. D: Appl. Phys. 2008. Vol. 41. N 13. P. 135 201.
- [13] *Дракон А.В., Еремин А.В., Куликов С.В., Фортон В.Е.* // Докл. АН. 2010. Т. 432. № 3. С. 326–328.
- [14] *Генич А.П., Куликов С.В., Манелис Г.Б. и др.* // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 1986. Т. 26. № 12. С. 1839–1854.
- [15] *Струминский В.В., Великодный В.Ю.* // ДАН СССР. 1982. Т. 226. № 1. С. 28–31.
- [16] *Берд Г.* Молекулярная газовая динамика. М.: Мир, 1981. 319 с. [Bird G.A., Molecular gas dynamics. Oxford: Clarendon Press, 1976.]
- [17] *Bazhenova T.V., Emelianov A.V., Eremin A.V., Velicodny V.Y.* // Proc. of the ISSW-21. Great Keppel, Australia, 1998. P. 195.
- [18] *Косынкин В.Д., Генелов Н.А.* // ФГВ. 1966. № 4. С. 62–67.
- [19] *Куликов С.В., Берзигияров П.К.* // Вычисл. методы и програм. 2002. Т. 3. № 2. С. 51–56.
- [20] *Куликов С.В., Смирнов А.Л., Терновая О.Н.* // Хим. физика. 2000. Т. 19. № 12. С. 53–61.