[5] Shipman L. L. Phot. and Phot., 1980, **31**, p. 157. [6] Gochanour C. R., Andersen H. C., Fayer M. D. J. Chem. Phys., 1980, **70**, p. 4254. [7] Loring R. F., Andersen H. C., Fayer M. D. J. Chem. Phys., 1982, **76**, p. 2015. [8] Gochanour C. R., Fayer M. D. J. Chem. Phys., 1981, **85**, p. 1989. [9] Шувалов В. А. и др. ДАН СССР, 1979, **248**, с. 756.

Поступила в редакцию
14.02.84

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ, 1985, т. 26, № 1

УДК 551.511.32:551.515.2

ОБ ОДНОЙ ВОЗМОЖНОСТИ МОДЕЛИРОВАНИЯ НЕЛИНЕЙНОЙ ЗАДАЧИ ОБТЕКАНИЯ С УЧЕТОМ СДВИГА СКОРОСТИ И СЖИМАЕМОСТИ

В. Н. Кожевников, Л. Э. Ронту (Финляндия)

(кафедра физики атмосферы)

Как известно, основная трудность решения задач гидродинамики расслоенной жидкости состоит в нелинейности определяющих уравнений. При исследовании обтекания гор установлено два-три способа более или менее обоснованного сведения этой задачи к линейному уравнению для не малых возмущений [1—5]. Опыт детального сопоставления результатов теоретического моделирования с данными наблюдений [6] показал, что нужны разработки, в которых указанная проблема решается при более полном учете сдвига скорости и сжимаемости атмосферы. В данной работе предлагается новый вариант решения этой задачи, в ряде отношений улучшающий прежние.

Систему уравнений движения в стационарном двумерном случае можно (см. например, [7]) записать в форме

$$\tau\frac{du'}{dt'} = -\frac{\partial\pi}{\partial x},\quad \tau\frac{dw'}{dt'} = -\frac{\partial\pi}{\partial z} - g\tau,\quad \frac{d}{dt'} = u'\frac{\partial}{\partial x} + w'\frac{\partial}{\partial z}, \tag{1}$$

где u', w' — компоненты скорости в плоскости координат x, z; τ и π — обратная потенциальная температура и приведенное давление, определяемые как

$$\tau = \mathrm{T}^{-1}(p/p_1)^{(\varkappa-1)/\varkappa},\quad \pi = c_p(p/p_1)^{(\varkappa-1)/\varkappa},\quad \pi/\tau = c_p\mathrm{T}, \tag{2}$$

p и T — давление и температура, $p_1 = 1000$ мбар, $\varkappa = c_p/c_v$ — отношение удельных теплоемкостей. В качестве эталонного состояния атмосферы будем считать состояние натекающего потока, невозмущенного достаточно далеко перед неровностями рельефа. Отмечая значения параметров в натекающем потоке на земле нулевым индексом снизу, можем получить соотношения

$$\delta = \tau/\tau_0 = (\mathrm{T}_0/\mathrm{T})\,(p/p_0)^{(\varkappa-1)/\varkappa},\quad \pi/\pi_0 = (p/p_0)^{(\varkappa-1)/\varkappa}, \tag{2a}$$

$$\delta\,(\mathrm{T}/\mathrm{T}_0) = \pi/\pi_0,\quad \pi_0/\tau_0 = c_p\mathrm{T}_0. \tag{3}$$

Вводим ассоциативные компоненты скорости

$$u = u'(\delta)^{1/2},\quad w = w'(\delta)^{1/2}, \tag{4}$$

предполагаем адиабатичность движений и учитываем справедливость закона Бернулли, т. е. исходим из выполнения закономерностей

$$\frac{d}{dt'}\delta = \frac{d}{dt'}H = 0,\quad H = \pi/\tau + \frac{1}{2}q'^2 + gz,\quad q'^2 = u'^2 + w'^2. \tag{5}$$

Тогда (1) нетрудно привести к виду

$$\tau_0 \frac{du}{dt} = -\frac{\partial \pi}{\partial x}, \quad \tau_0 \frac{dw}{dt} = -\frac{\partial \pi}{\partial z} - g\tau, \quad \frac{d}{dt} = u\frac{\partial}{\partial x} + w\frac{\partial}{\partial z}, \tag{6}$$

или, если ввести ассоциативный вихрь $\Omega = \partial u/\partial z - \partial w/\partial x$, к виду

$$\Omega(udz - wdx) + (gzd\delta - dh) = 0, \quad h = \delta H. \tag{7}$$

В уравнении неразрывности будем учитывать главное действие сжимаемости атмосферы, используя формулы

$$\operatorname{div} \mathbf{V}' = \sigma w', \quad \mathbf{V}' = \mathbf{V}'(u', w'), \quad \sigma = (3{,}5\gamma_a - \gamma_c) T_c^{-1}, \tag{8}$$

где γ_a и γ_c — сухоадиабатический и средний градиент температуры рассматриваемого слоя атмосферы в натекающем потоке, T_c — средняя температура в нем. Соотношение (8) справедливо также и для ассоциативных скоростей, и это позволяет ввести функцию тока ψ посредством выражений

$$u = -\exp(\sigma z)\frac{\partial \psi}{\partial z}, \quad w = \exp(\sigma z)\frac{\partial \psi}{\partial x}. \tag{9}$$

Тогда (7) можно переписать в виде

$$\nabla^2\psi + \sigma\frac{\partial \psi}{\partial z} + \exp(-2\sigma z)\left[gz\frac{d\delta}{d\psi} - \frac{dh}{d\psi}\right] = 0, \quad \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \tag{10}$$

Тем самым задача сведена к решению нелинейного уравнения для функции тока. Производные в квадратных скобках, согласно изложенному выше, полностью определяются свойствами натекающего потока. В случае, когда

$$\frac{d\delta}{d\psi} = A_1\psi + B_1, \quad \frac{dh}{d\psi} = A_2\psi + B_2, \tag{11}$$

выписанное уравнение становится линейным:

$$\nabla^2\psi + \sigma\frac{\partial \psi}{\partial z} + \exp(-2\sigma z)\left[(gzA_1 - A_2)\psi + (gzB_1 - B_2)\right] = 0. \tag{12}$$

Для выяснения возможностей этой модели надо установить, какие свойства натекающего потока воспроизводятся ею. Эту задачу можно решить, используя следующие соотношения, получающиеся из (9), (12) при $x \to -\infty$:

$$\frac{d^2\psi_1}{dz^2} + \sigma\frac{d\psi_1}{dz} + e^{-2\sigma z}\left[(gzA_1 - A_2)\psi_1 + (gzB_1 - B_2)\right] = 0, \tag{13}$$

$$\frac{d\psi_1}{dz} = -u_1\exp(-\sigma z), \quad u_1(z) = u(x, z)|_{x=-\infty}, \quad \psi_1 = \psi(x, z)|_{x=-\infty}. \tag{14}$$

Не ограничивая общности подхода, решение проблемы сводим к решению (13), предполагая, что $\psi_1(0) = 0$. Взяв в качестве характерного вертикального масштаба величину 10 км, удобно это решение представить в виде

$$\psi_1 = \psi_0(\xi)\exp[-\sigma(5\text{ км})\xi], \quad \psi_0 = \sum_{n=1}^{\infty}\alpha_n\xi^n, \quad \xi = \frac{z}{10\text{ км}}, \quad \alpha_1 = -u_0(10\text{ км}),$$

$$\alpha_2 = 0{,}5B_2(10\text{ км})^2, \quad u_0 = u_1(0), \quad \alpha_0 = 0,$$

$$\alpha_{n+2} = (10\text{ км})^2[(n+1)(n+2)]^{-1}[A\alpha_n + Q_n + \beta_n], \quad n = 1, 2, 3, \ldots,$$

$$\beta_n = (10\,\text{км})^n \frac{b^{n-1}}{(n-1)!}\left(\frac{bB_2}{n} - gB_1\right), \quad \mu_n = (10\,\text{км})^n \frac{a^{n-1}}{(n-1)!}\left(\frac{aA_2}{n} - gA_1\right),$$

$$Q_n = \sum_{k=1}^{n-1} \mu_k \alpha_{n-k}, \quad A = A_2 + (\sigma/2)^2, \quad b = -1{,}5\sigma, \quad a = -2\sigma. \qquad (15)$$

Натекающий поток полностью характеризуется скоростью, температурой и величиной π. Задаваясь значениями этих параметров на земле, мы получаем возможность однозначно определить по вышеприведенным формулам искомые профили этих величин для любого варианта задания коэффициентов (A_i, B_i, $i=1, 2$). Расчет при этом начинается с определения $\psi_1(\xi)$ по (15). После этого из (14) находится $u_1(z)$, а затем с учетом того, что согласно (3)—(5), (7)

$$\delta_0 = 1, \; h_0 = \pi_0/\tau_0 + 0{,}5\, u_0^2 \simeq c_p T_0,$$

определяются на основе (11) профили $\delta(z)$ и $h(z)$. Это дает возможность по (4) найти искомый профиль скорости $u_1'(z)$, а после этого по (7) $H(z)$ и, значит, по (5) π/τ. Последняя величина используется для расчета по (2) $T(z)$ и на основании этого по (3) $\pi(z)$. На первом этапе вычисления $\psi_1(\xi)$ нам недостает знания σ, поскольку не известен заранее профиль температуры (см. (8)). Дело облегчается тем, что решение от σ зависит слабо. Поэтому допустимо вначале задаться некоторым характерным σ для тропосферы. После завершения расчетов и получения $T(z)$ нетрудно вычислить значения γ_c и T_c и уточнить по (8) величину σ. Повторение расчетов с новым σ дает возможность определить искомые профили с нужной точностью.

Опыт теоретического моделирования [1, 6] показывает, что главные свойства натекающего потока нагляднее всего характеризуются скоростью и градиентом температуры. Поэтому основное внимание было обращено на зависимость от параметров (A_i, B_i) профилей именно этих величин. Для градиента температуры с этой целью на основе вышеприведенных соотношений были получены выражения

$$\gamma(z) = -\frac{dT}{dz} = \gamma_a + \frac{u}{g\delta}\gamma_a \frac{du}{dz} - \frac{T_0}{\delta}\frac{d\psi_1}{dz}\left\{\left[\frac{A_2}{h_0} - A_1\left(\frac{T}{T_0} + \frac{\gamma_a}{T_0}z\right)\right]\psi_1 + \right.$$

$$\left. + \frac{B_2}{h_0} - B_1\left(\frac{T}{T_0} + \frac{\gamma_a}{T_0}z\right)\right\}, \qquad (16)$$

$$\gamma_0 = \gamma(0) = \gamma_a - u_0 T_0 B_1. \qquad (17)$$

Отсюда ясно, что задание B_1 при выбранных u_0, T_0 фактически определяет величину γ_0 и наоборот. Нетрудно также на основании (14), (15) сделать вывод, что величина B_2 прямо пропорциональна градиенту скорости на поверхности земли.

Исследование свойств натекающего потока проводилось с помощью ЭВМ БЭСМ-6 НИВЦ МГУ при задании $u_0 = 10$ и 20 м/с, $T_0 = 290$ К, $g = 10$ м/с^2, $\sigma = 0{,}112$ км$^{-1}$. Основные итоги расчетов иллюстрируются на рис. 1—4, где представлены профили γ и u_1' при различных значениях коэффициентов A_i, B_i. Безразмерные высоты представлены на боковых вертикалях. Профили градиента температуры изображены сплошными кривыми, скорости — пунктирными. Расчеты показали, что свойства натекающего потока плавно изменяются при изменении величины определяющих параметров. При этом мы ограничились рассмотрением только части диапазона их возможных значений, стремясь выявить прежде всего те ситуации, которые наиболее

близки к типичному состоянию тропосферы. На рис. 1, 2 представлены зависимости результатов от величины A_i при $B_2=0$ и $\gamma_0=6$ град/км для двух значений скорости u_0. На каждом из этих рисунков приведе-

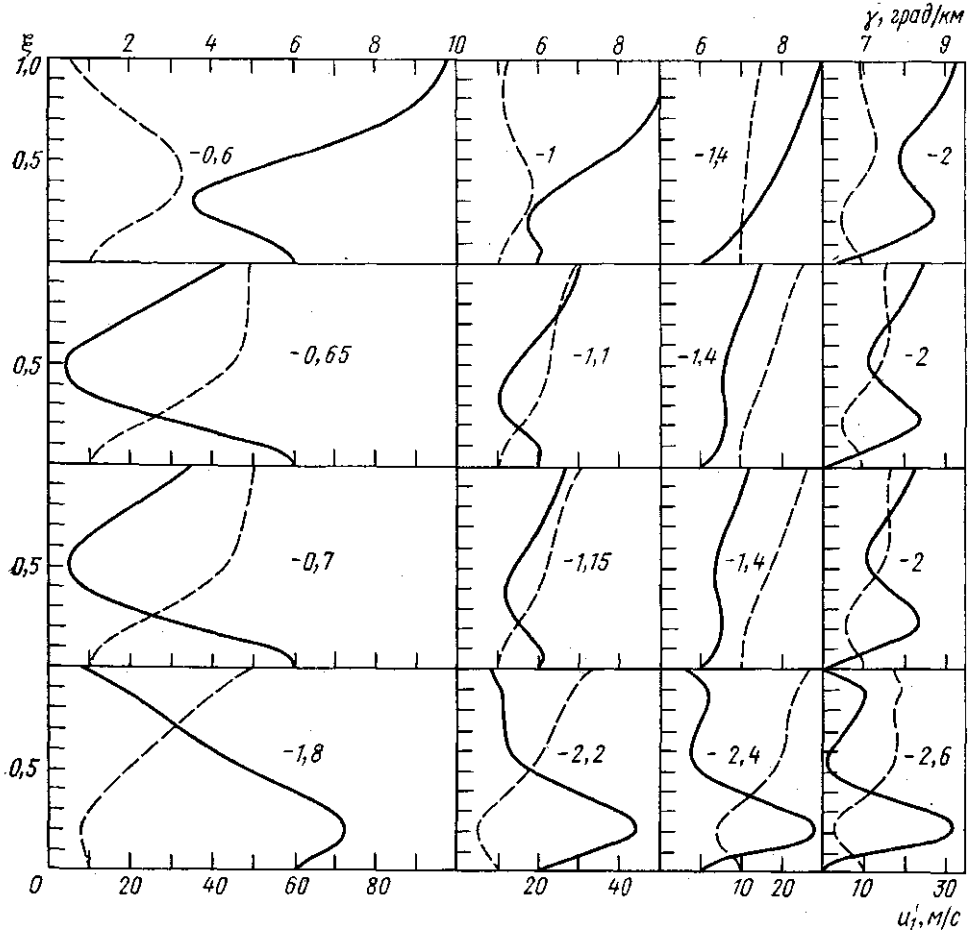


Рис. 1. Зависимость профилей устойчивости (сплошные кривые) и скорости (пунктир) в натекающем потоке от величин A_1, A_2 при $u_0=10$ м·с$^{-1}$, $\gamma_0=6$ град·км$^{-1}$, $B_1=1{,}38$ с·км$^{-2}$, $B_2=0$. Величина A_1 для каждой серии из четырех примеров, расположенных по горизонтали, постоянна и принимает значения (сверху вниз) 6; 1; 0,5 и —7 с^2·км$^{-4}$. Величина A_2 в км$^{-2}$ представлена непосредственно на каждом из рисунков

но по 16 примеров. При этом самыми интересными из них с нашей точки зрения являются примеры, расположенные в центральной части (их по четыре на каждом рисунке). При смещении в любую сторону от этих примеров за счет вариации A_i мы приближаемся к предельно допустимым ситуациям: дальнейшее изменение A_i приводит к тому, что в потоке будут появляться либо уровни с $\gamma \geqslant \gamma_a$, либо уровни с $u_1' \leqslant 0$, либо слишком большие скорости. Рис. 3 дает нам представление о влиянии на результат вариаций γ_0, рис. 4 — величины B_2. Рис. 5, на котором приведены кроме γ и u_1' профили всех остальных рассчитывавшихся величин, позволяет получить представление об их типичных значениях.

Отдельно было исследовано, что может дать уточнение величины σ. Для этого были проделаны соответствующие расчеты для случаев, когда $u_0=10$, $A_1=0{,}5$, $\gamma_0=6$, $B_2=0$, а A_2 принимало одно из трех

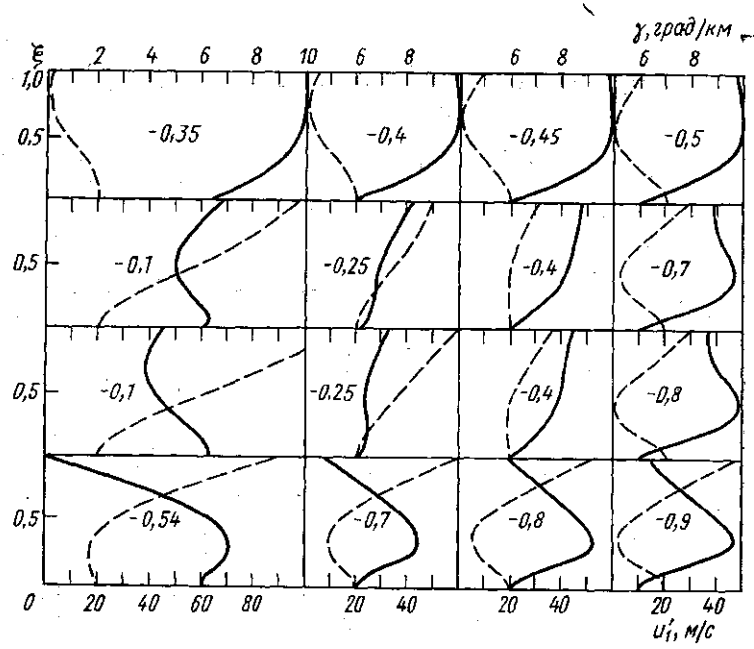


Рис. 2. Зависимости, аналогичные изображенным на рис. 1, при $u_0=$ $=20$ м/с, $A_1=6$; 1; 0,5; —4 с²·км⁻⁴ (остальные параметры те же)

значений: — 0,7, — 1,15 или — 2 (см. рис. 1). Выяснилось, что при $A_2=-1{,}15$, когда изменения γ были малыми, такое уточнение дает столь малый эффект, что его нельзя представить на рис. 1. В двух

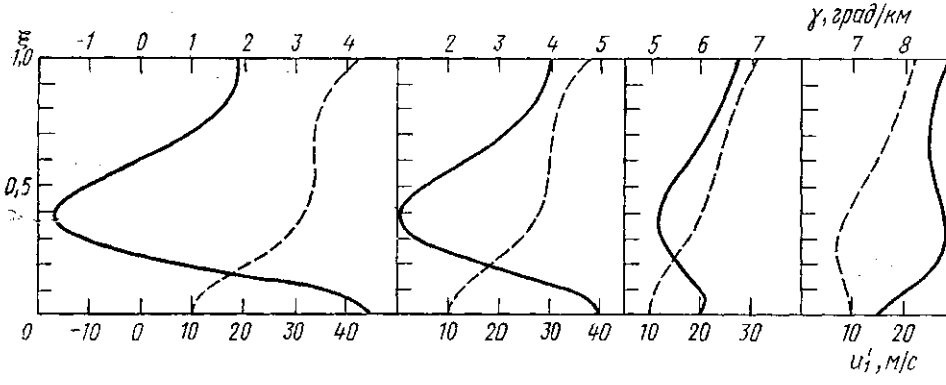


Рис. 3. Зависимость тех же характеристик натекающего потока от величины γ_0. При этом в прежних единицах $u_0=10$, $A_1=0{,}5$, $A_2=-1{,}15$, $B_2=0$, а величина γ_0 изменялась от примера к примеру и составляла 4,5; 5; 6 и 7,5 (т. е. B_1 соответственно 1,896; 1,72414; 1,38 и 0,862)

других случаях результат был чуть заметнее, но характер профилей качественно не изменялся.

Таким образом, можно констатировать что предложенный в данной работе вариант сведения задачи к линейному уравнению перспек-

тивен. По сравнению с прежними подходами [1, 3, 6], которые рассматривали атмосферу как расслоенную несжимаемую среду, данный метод, во-первых, более корректен, а во-вторых, он позволяет учесть

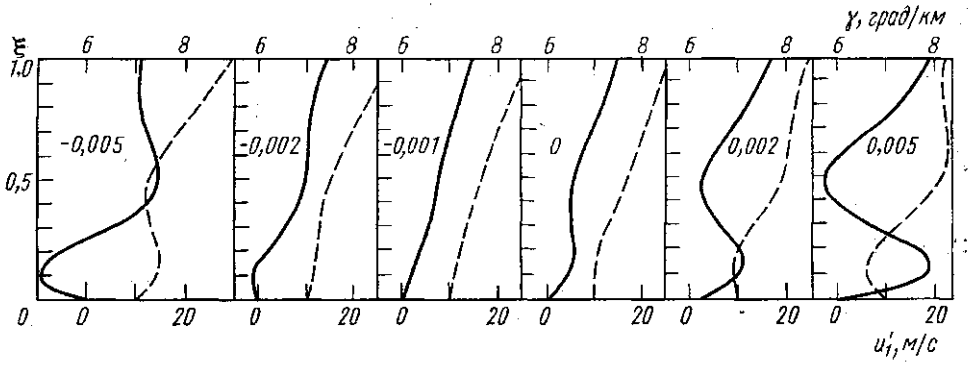


Рис. 4. Зависимость тех же характеристик от величины B_2. В прежних единицах $u_0=10$, $A_1=1$, $A_2=-1{,}4$, $\gamma_0=6$; значения переменной B_2 проставлены на рисунках в c^{-1}.

в достаточно широком диапазоне изменения устойчивости и сдвига скорости атмосферы. Для сжимаемой среды, насколько нам известно, был до сих пор предложен только один вариант нужного преобразования уравнений в работах [4, 5]. Однако при этом использовались

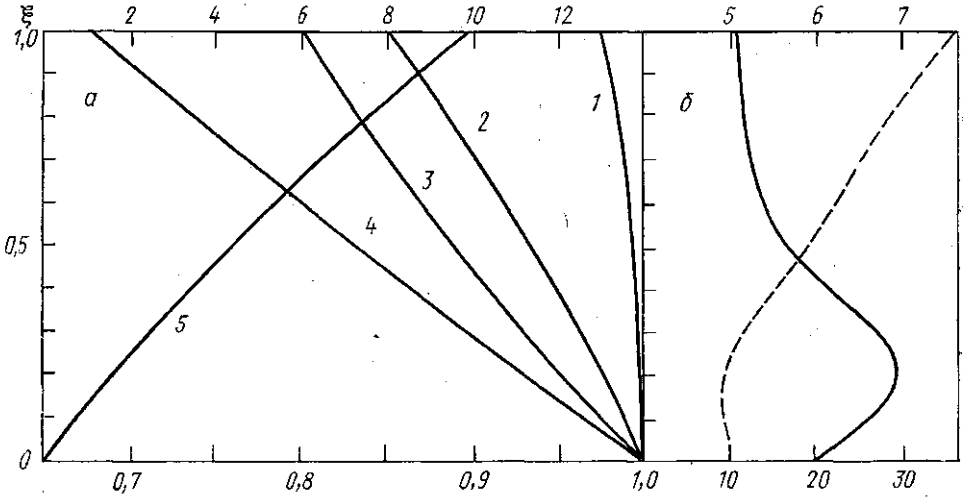


Рис. 5. Характерное поведение с высотой всех характеристик натекающего потока (на примере, когда в прежних единицах $u_0=10$, $\gamma_0=6$, $A_1=-3$, $A_2=-1{,}6$, $B_2=0$). *а* — Профили h/h_0, δ, T/T_0, π/π_0 и $-\psi_1$ — кривые *1, 2, 3, 4, 5*; верхняя шкала — для $|\psi_1|\cdot 10^2$ (размерность ψ_1 км$^2\cdot$с$^{-1}$), нижняя — для остальных величин. *б* — Профили γ и u_1' в виде, аналогичном рис. 1—4

упрощения, справедливость которых не так уж бесспорна, тогда как в данном подходе используется лишь вполне оправданное упрощение уравнения неразрывности. В [4, 5], кроме того, недостаточно выяснено, какие профили устойчивости и скорости натекающего потока воспроизводятся в модели.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Кожевников В. Н. Тр. Центр. аэролог. обсерватории, 1970, вып. 98, с. 3. [2] Smith R. B. Adv. in Geophys., 1979, **21**, p. 87. [3] Yih Ch.-Sh. J. Fluid Mech., 1960, **9**, N 2, p. 161. [4] Yih Ch-Sh. J. Fluid Mech., 1960, **9**, N 1, p. 68. [5] Claus A. J. J. Fluid Mech., 1964, **19**, N 2, p. 267. [6] Кожевников В. Н., Бибикова Т. Н., Журба Е. В. Изв. АН СССР. ФАО, 1977, **13**, с. 451. [7] Скорер Р. Аэродинамика окружающей среды. М.: Мир, 1980.

Поступила в редакцию
14.02.84

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ, 1985, т. 26, № 1

УДК 541.66

ВЫБОР ЦЕНТРА МОЛЕКУЛЫ ПРИ РАСЧЕТЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ЖИДКОСТЕЙ И ГАЗОВ

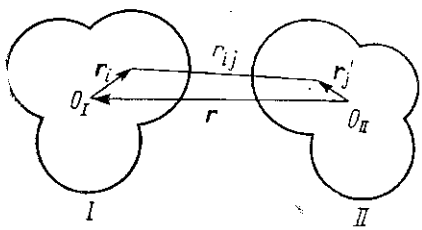
А. Д. Охоцимский, В. Г. Грязнов

(кафедра молекулярной физики)

В работах [1—7] развита методика расчета свойств жидкостей и газов, которая, как показано в [7], позволяет надежно предсказывать комплекс термодинамических свойств неассоциированных веществ во всей области состояний жидко-газовой фазы, опираясь только на сведения о структуре молекулы. Ключевым этапом в методике [1—7] является расчет трех фундаментальных параметров вещества. Один из этих параметров — мольный критический объем $v_{кр}$ — в работах [2—4] предложено рассчитывать как величину, пропорциональную третьей степени среднего поперечника молекулы l:

$$l = \sum_i p_i (d_i + \sigma_i). \tag{1}$$

Здесь суммирование производится по всем наружным атомам молекулы; d_i — удвоенное расстояние от центра молекулы до ядра i-го наружного атома, σ_i — ван-дер-ваальсов диаметр последнего, p_i — веса, отвечающие различным наружным атомам $\left(\sum_i p_i = 1\right)$ [4]. Физический смысл величины l, как выяснено в [8], определяется тем, что l однозначно связана с равновесным расстоянием в эффективном центральном потенциале взаимодействия многоатомных молекул. Для центрально-симметричных молекул определение центра не вызывает трудностей. Цель данной работы — получение формулы, определяющей положение центра молекулы в случае отсутствия у нее центра симметрии.



Центром несимметричной молекулы будем считать точку, относительно которой межмолекулярный потенциал ближе всего к центральному. Пусть $\varphi(r, \omega_I, \omega_{II})$ — межмолекулярный потенциал, где r — расстояние между центрами молекул, а ω_I и ω_{II} — совокупность угловых переменных, характеризующих ориентации двух одинаковых взаимодействующих молекул I и II (рисунок). Усредняя межмолекулярный потенциал по всем ориентациям молекул I и II, можно получить