

УДК 533.7

© 2004 г. А. В. КОЗЛОВ

## ВЛИЯНИЕ ПОТЕНЦИАЛА МЕЖМОЛЕКУЛЯРНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА ОБОБЩЕННЫЕ СООТНОШЕНИЯ НЬЮТОНА–ФУРЬЕ В ЗАДАЧЕ ОБ ИСТЕЧЕНИИ ГАЗА В ВАКУУМ

С помощью численного метода прямого статистического моделирования анализируется влияние показателя потенциала межмолекулярного взаимодействия на зависимости напряжения и теплового потока от составляющих тензора скоростей деформации и градиента температуры при неравновесном сферически симметричном истечении одноатомного газа в вакуум. Приведены аналитические аппроксимации определяющих соотношений. Определены зависимости макроскопических параметров от расстояния до источника.

*Ключевые слова:* разреженный газ, уравнение Больцмана, метод прямого статистического моделирования Монте-Карло, сферическое истечение в вакуум.

Задача о сферическом разлете газа в вакуум моделирует течение на оси струи, истекающей из осесимметричного сопла. Когда длина свободного пробега молекул вблизи источника много меньше его размера, начальный участок течения, начиная от звуковой линии, может быть описан в рамках уравнений идеального газа. Температура в приближении Эйлера асимптотически стремится к нулю при удалении от источника, скорость достигает своего максимального значения, плотность убывает обратно пропорционально квадрату расстояния до центра сферического источника, а число Маха при этом стремится к бесконечности.

Однако уравнения Эйлера неприменимы для всей области течения. При удалении от источника длина свободного пробега становится сравнимой с расстоянием до источника. Молекулы при сферическом разлете в вакуум испытывают в среднем лишь конечное количество столкновений. Течение принимает сильно неравновесный характер, и предположение о равенстве нулю вязких напряжений и тепловых потоков, лежащее в основе уравнений Эйлера, перестает выполняться.

В [1] данное течение описывается с помощью уравнений Навье–Стокса. Там же показано, что эти уравнения не дают корректного описания течения газа на большом расстоянии от источника. В [2] установлено, что уравнения Навье–Стокса применимы для описания течения при переходе через звуковую линию в случае, если данная область находится вне слоя Кнудсена (области релаксации начальной неравновесности течения). Адекватное математическое описание рассматриваемого течения дают кинетическое уравнение Больцмана и отчасти его модели. В [3] использовалась кинетическая модель Крука, в [4] проводился расчет методом прямого статистического моделирования Монте-Карло.

В [5, 6] в гиперзвуковом приближении получена макроскопическая модель рассматриваемого течения, являющаяся следствием бесконечной цепочки макроскопических моментных уравнений, эквивалентной уравнению Больцмана. Эта модель является асимптотически точной для максвелловских молекул. Показано, что в отличие от модели идеального газа, при удалении от источника существует конечное предельное значение температуры, что подтверждено в эксперименте [7]. Макроскопические параметры (плотность, скорость, температура), полученные при решении уравнений ги-

перзвукowego приближения, с высокой точностью совпадают с аналогичными характеристиками, полученными методом прямого статистического моделирования [8].

В [8] исследованы процессы переноса при неравновесном сферическом расширении в вакуум одноатомного газа, состоящего из максвелловских молекул, и установлена возможность математического моделирования такого течения методами механики сплошной среды при малом числе Кнудсена на источнике. Численно получены определяющие соотношения (обобщенные соотношения Ньютона и Фурье), представляющие зависимость напряжения и теплового потока от составляющих тензора скоростей деформации и градиента температуры для данной модели молекул. Другой пример использования определяющих соотношений для макроскопического описания сильно неравновесного течения приведен в [9].

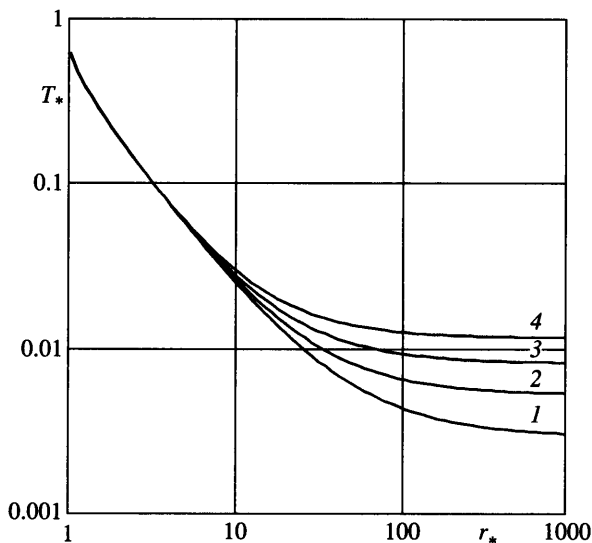
Настоящая работа выполнена с целью обобщения результатов [8] для различных значений показателя потенциала межмолекулярного взаимодействия.

**1. Постановка задачи и метод решения.** Для исследования характеристик сферически симметричного разлета одноатомного газа в вакуум используется кинетическое уравнение Больцмана. В качестве модели взаимодействия молекул применяется модель псевдостепенных сфер, которая моделирует взаимодействие молекул со степенным потенциалом  $U(r) = cr^{-v}$ . В этом случае коэффициенты вязкости и теплопроводности  $\mu \propto k \propto T^{\omega}$ ,  $\omega = 1/2 + 2/v$ . Граничные условия для решения уравнения Больцмана ставятся на сферической поверхности радиуса  $r_1$ , с которой вылетают молекулы с максвелловским распределением по скоростям. Функция распределения определяется параметрами  $\rho_1, T_1$  (плотность и температура), массовая скорость равна нулю. Вводятся безразмерные переменные: расстояние  $r^* = r/r_1$ , плотность  $\rho_* = \rho/\rho_1$ , скорость  $u_* = u/\sqrt{(5/3)RT_1}$ , температура  $T_* = T/T_1$ , нормальные напряжения  $p_{rr^*} = p_{rr}/(\rho_1 RT_1)$  и поток тепла  $q_{r^*} = q_r/(\rho_1 (RT_1)^{3/2})$ . Число Кнудсена  $Kn_1 = \lambda_1/r_1$ , где  $\lambda_1$  – средняя длина свободного пробега молекул, соответствующая функции распределения вылетающих из источника молекул. Длина свободного пробега псевдостепенных сфер связана с коэффициентом вязкости соотношением  $\lambda = 32(v-1)(3v-2)\mu/(15\pi r c)$ .

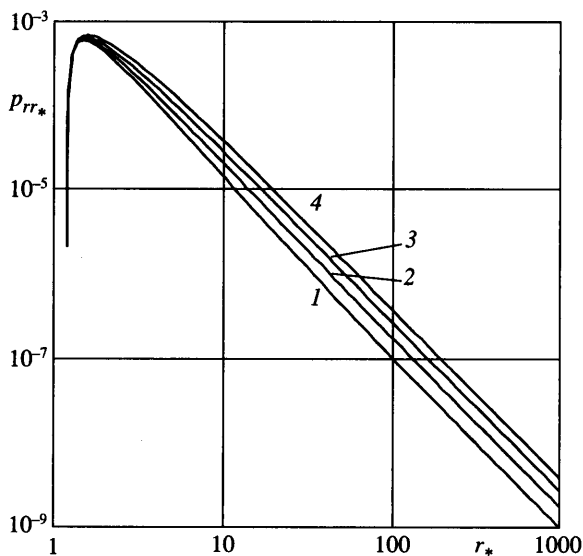
Для решения уравнения Больцмана используется метод прямого статистического моделирования Монте-Карло [10]. Особенности применения метода в данной работе подробно описаны в [8].

Все расчеты выполнены для  $Kn_1 = 0.002$ . При этом слой Кнудсена не выходит за пределы сферической области, ограниченной звуковой поверхностью [2]. Толщина кнудсеновского слоя в рассматриваемой задаче составляет приблизительно  $10\lambda_1$ .

**2. Влияние показателя потенциала межмолекулярного взаимодействия на макроскопические параметры.** На фиг. 1 представлены рассчитанные методом прямого статистического моделирования зависимости температуры газа от расстояния до центра источника при различных значениях показателя  $v$ . При изменении  $v$  от 4 до  $\infty$ , что соответствует переходу от максвелловских молекул к твердым сферам, наблюдается увеличение предельного значения температуры. Это объясняется тем, что у твердых сфер сечение столкновения не зависит от относительной скорости и, следовательно, от температуры, а у более “мягких” молекул оно увеличивается при уменьшении температуры. Поэтому у твердых сфер быстрее растет длина свободного пробега, и стабилизация температуры наступает при меньших значениях расстояния до источника. Плотность и скорость по результатам расчетов очень слабо зависят от  $v$ . Напряжения и тепловые потоки при увеличении  $v$  медленнее убывают с увеличением  $r$  в зоне, где течение близко к газодинамическому (фиг. 2, 3). Это связано с тем, что более “жестким” молекулам соответствует меньшее значение показателя степенной зависимости коэффициентов вязкости и теплопроводности от температуры. В сильно неравновесной области, где температура стабилизировалась, напряжения и тепловые потоки



Фиг. 1. Зависимость температуры газа от расстояния до центра сферического источника при кривых  $Kn_1 = 0.002$ : 1 –  $\nu$ , 2 – 6, 3 – 12, 4 –  $\infty$



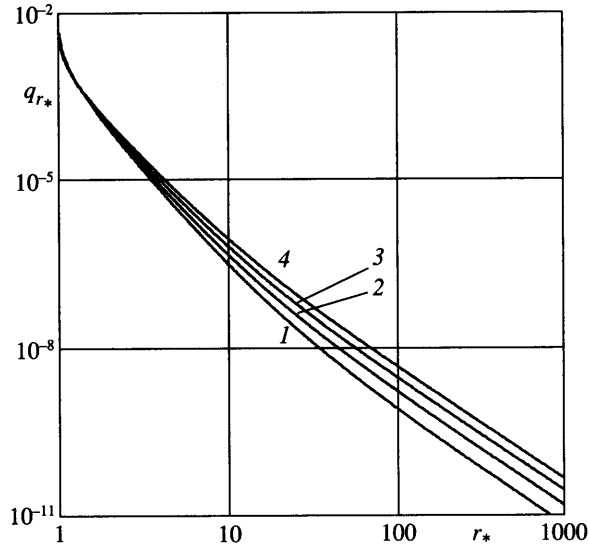
Фиг. 2. Зависимость нормальных напряжений от расстояния до центра сферического источника. Обозначения см. на фиг. 1

убывают обратно пропорционально квадрату расстояния до источника. Таким образом, более высоким значениям  $\nu$  соответствуют большие значения напряжений и теплового потока вдали от источника при одинаковых значениях  $r$ .

**3. Обобщенные соотношения Ньютона – Фурье.** В одномерном сферическом течении соотношения Ньютона и Фурье имеют вид

$$p_{rr}^N = -\frac{4\mu}{3}\left(\frac{\partial u}{\partial r} - \frac{u}{r}\right), \quad q_r^F = -k\frac{\partial T}{\partial r} \tag{3.1}$$

где  $p_{rr}^N$  – нормальное напряжение,  $q_r^F$  – поток тепла.



Фиг. 3. Зависимость потока тепла от расстояния до центра сферического источника. Обозначения см. на фиг. 1

Как показано в [8], при малых числах  $Kn_1$ , т.е. когда область начальной неравновесности, обусловленной граничными условиями, мала, можно ввести обобщенные соотношения Ньютона – Фурье, которые определяются нелинейными зависимостями

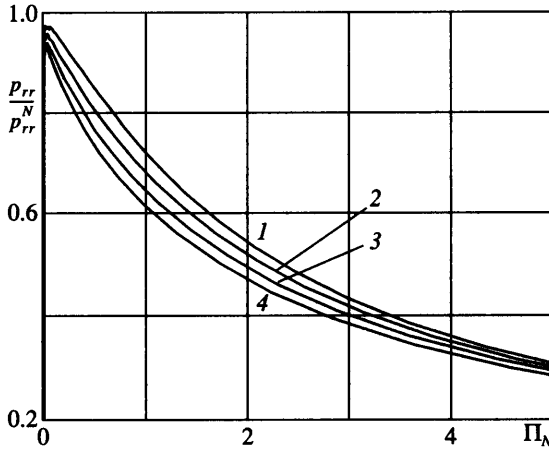
$$p_{rr} = p_{rr}^N P(\Pi_N), \quad q_r = q_r^F Q(\Pi_N), \quad \Pi_N = \frac{p_{rr}^N}{p} \quad (3.2)$$

где  $P$  и  $Q$  – функции, определенные при решении кинетического уравнения Больцмана методом прямого статистического моделирования.

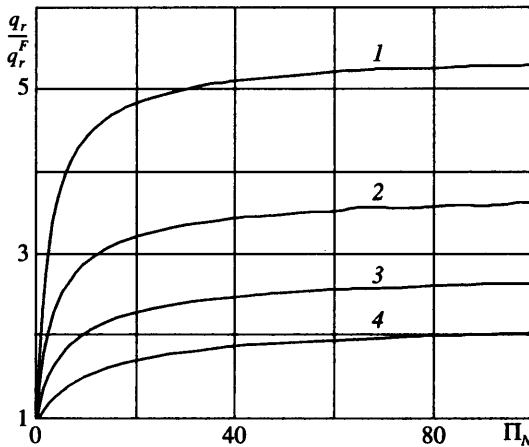
Независимую переменную  $\Pi_N$  можно рассматривать как меру неравновесности в данном течении. Отметим, что это отношение вдали от источника стремится к бесконечности [8]. Соотношения (3.2) позволяют замкнуть систему законов сохранения массы, импульса и энергии и получить макроскопическое описание данного течения.

На фиг. 4, 5 приведены рассчитанные методом прямого статистического моделирования отношения  $p_{rr}/p_{rr}^N$  и  $q_r/q_r^F$  в зависимости от указанной независимой переменной при различных значениях  $v$ . Величины  $p_{rr}^N$  и  $q_r^F$  рассчитаны по соотношениям (3.1) на основе газодинамических величин  $u$  и  $T$ , полученных в данном расчете. Как показано для максвелловских молекул в [8], при используемом в расчетах малом числе  $Kn_1$  эти кривые с хорошей точностью представляют предельные при  $Kn_1 \rightarrow 0$  зависимости  $P$  и  $Q$ .

При уменьшении  $\Pi_N$  кривые проходят вблизи единицы, т.е. соотношения Ньютона и Фурье выполняются с малой погрешностью. Это подтверждает тот факт, что вблизи источника течение близко к равновесному. Для отношения напряжений видна особенность в нуле, обусловленная тем, что нормальные напряжения меняют знак вблизи звуковой линии. При увеличении расстояния до центра источника  $p_{rr}/p_{rr}^N$  убывает как  $2/\Pi_N$ , что соответствует стремлению к нулю разброса скоростей молекул в поперечном направлении при стабилизации разброса скоростей в продольном направле-



Фиг. 4. Зависимость отношения истинных нормальных напряжений к нормальным напряжениям Ньютона от  $\Pi_N$ . Обозначения см. на фиг. 1 и уравнение (3.2)



Фиг. 5. Зависимость отношения истинного теплового потока к теплому потоку Фурье от  $\Pi_N$ . Обозначения см. на фиг. 1, 4

нии. Отношение  $q_r/q_r^F$  монотонно возрастает и стабилизируется, причем истинный тепловой поток в несколько раз превышает тепловой поток, рассчитанный по формуле Фурье.

Более “жестким” молекулам соответствует более низкие значения  $p_{rr}/p_{rr}^N$  при конечных значениях  $\Pi_N$  и более низкие предельные значения  $q_r/q_r^F$  при  $\Pi_N \rightarrow \infty$ .

На основе численных данных получены аппроксимации зависимостей  $P$  и  $Q$  с помощью дробно-рациональных выражений, справедливые для  $\nu = 4 - \infty$  с погрешностью, не превышающей 5%

$$P = \frac{p_{rr}}{p_{rr}^N} = (2\omega - 1) \frac{1 + \Pi_N}{1 + 1.25\Pi_N + 0.5\Pi_N^2} + 2(1 - \omega) \frac{1 + 1.884\Pi_N + 0.113\Pi_N^2}{1 + 2.730\Pi_N + 1.010\Pi_N^2 + 0.057\Pi_N^3}$$

$$Q = \frac{q_r}{q_r^F} = 1 + \frac{a_1(\omega)\Pi_N}{1 + a_2(\omega)\Pi_N}$$

$$a_1(\omega) = -0.857 + 4.552\omega - 8.475\omega^2 + 6.301\omega^3$$

$$a_2(\omega) = 0.178 + 1.082\omega + 2.262\omega^2 - 1.013\omega^3$$

При получении аппроксимации коэффициенты наклона касательной для зависимости  $P$  при  $\Pi_N = 0$  уточнены с помощью выражений Барнетта для напряжений (формула (3.50), глава III [11]). Записав выражения в сферических координатах и учитывая, что в гиперзвуковом приближении ( $M \gg 1$ )  $du/dr \ll u/r$  и  $RT \ll u^2$ , можно пренебречь соответствующими малыми членами и получить линейную зависимость  $p_{rr}/p_{rr}^N$  от  $\Pi_N$  в барнеттовском приближении, которая не является справедливой во всем поле течения, но уточняет выражение для напряжений Ньютона в малой окрестности точки  $\Pi_N = 0$ .

**Заключение.** Изменение показателя степенного потенциала межмолекулярного взаимодействия вызывает небольшое (порядка 10%) изменение обобщенных соотношений Ньютона для нормальных напряжений, но приводит к значительному изменению предельной температуры, а также сильно влияет на тепловые потоки. Полученные выражения для напряжений и теплового потока вместе с уравнениями сохранения массы, импульса и энергии дают замкнутое макроскопическое описание истечения в вакуум из газодинамического источника при произвольной степени неравновесности вдали от источника.

Автор благодарит О.Г. Фридлендера за помощь при проведении исследования.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (№ 02-01-00597) и Государственной программы поддержки ведущих научных школ (№ 00-15-96069 и НШ-1984.2003.1).

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Gusev V.N., Zhabkova A.V. The flow of a viscous heat-conducting compressible fluid into a constant pressure medium. // *Rarefied Gas Dynamics: Proc. 6<sup>th</sup> Intern. Symp.* / Ed. L. Trilling and H.Y. Wachman. N.Y.; L.: Acad. press, 1969. V. 1. P. 847–862.
2. Булгакова Н.М., Плотников М.Ю., Ребров А.К. Моделирование стационарного расширения газа с поверхности сферы в вакуум. // *Изв. РАН. МЖГ.* 1997. № 6. С. 137–143.
3. Шахов Е.М. Установившееся течение разреженного газа от сферического источника или стока. // *Изв. АН СССР. МЖГ.* 1971. № 2. С. 58–66.
4. Bird G.A. Breakdown of translational and rotational equilibrium in gaseous expansion. // *AIAA Journal.* 1970. V. 8. № 11. P. 1998–2003.
5. Hamel B.B., Willis D.R. Kinetic theory of source flow expansion with application to the free jet. // *Phys. Fluids.* 1966. V. 9. № 5. P. 829–841.
6. Edwards R.H., Cheng H.K. Steady expansion of a gas into a vacuum. // *AIAA Journal.* 1966. V. 4. № 3. P. 558–561.
7. Abuaf N., Anderson J.B., Andres R.P., Fenn J.B., Miller D.R. Studies of low density supersonic jets. // *Rarefied Gas Dynamics: Proc. 5<sup>th</sup> Intern. Symp.* / Ed. C.L. Brundin. N.Y.: Acad. press, 1967. V. 2. P. 1317.
8. Козлов А.В. Процессы переноса при неравновесном сферически симметричном истечении газа в вакуум. // *Изв. РАН. МЖГ.* 2002. № 3. С. 123–133.
9. Erofeev A.I., Friedlander O.G. Macroscopic relations in rarefied shear flows // *Rarefied Gas Dynamics: Proc. 22nd Intern. Symp.* / Eds. T.J. Bartel and M.A. Gallis. Amer. Inst. Phys. 2001. V. 585. P. 164–168.
10. Берд Г. Молекулярная газовая динамика. М.: Мир, 1981. 319 с.
11. Коган М.Н. Динамика разреженного газа. М.: Наука, 1967. 440 с.