

УДК 333.6.011

АНАЛИТИЧЕСКИЕ ОЦЕНКИ ПАРАМЕТРОВ СВОБОДНОЙ СТРУИ ОДНОАТОМНОГО ГАЗА, ИСТЕКАЮЩЕЙ В ВАКУУМ

А.В. Лазарев, Н.Н. Застенкер, Д.Н. Трубников

(кафедра физической химии; e-mail: tdn@phys.chem.msu.ru)

Методом моментов с использованием эллипсоидальной функции распределения решено уравнение Больцмана для сферического расширения свободной струи одноатомных газов, атомы которых взаимодействуют с потенциалом Леннарда–Джонса. Для анализа системы моментных уравнений использовался метод сращивания асимптотических разложений. Построены составные разложения, позволяющие получить достаточно точные оценки параметров струи во всем поле течения. Выполнено сравнение с экспериментальными данными для струй аргона.

Для проектирования струйных установок, планирования экспериментов с молекулярными пучками, а также при теоретическом рассмотрении ряда физико-химических процессов, протекающих в струе и слабо возмущающих поле течения, полезны достаточно точные аналитические распределения параметров однокомпонентной струи вдоль оси течения. Простая модель однокомпонентной струи, дающая такие распределения, может быть построена на основе эллипсоидальной функции распределения без предположения о слабой неравновесности струи.

Использование эллипсоидальной функции распределения, впервые предложенной для описания сверхзвуковых струй Гамелем и Виллисом [1], стало стандартным подходом во многих теоретических и экспериментальных исследованиях поступательной релаксации в струях [2–12]. На ее основе был развит моментный метод решения уравнения Больцмана для сверхзвуковых струй одноатомных [3, 4, 6–9] и многоатомных [10, 11, 13] газов. Однако даже такой простой выбор модели функции распределения приводит к сложной нелинейной системе уравнений для моментов, интегрируемой обычно численно [6, 10].

Аналитические результаты в этом случае могут быть получены при использовании асимптотических методов анализа [1, 4, 12, 14, 15], которые успешно применялись для кинетических уравнений с модельными интегралами столкновений [1, 14, 15] или для модели максвелловских молекул [4]. В случае реалистического потенциала взаимодействия Леннарда–Джонса (12–6) такой анализ был выполнен при использовании для решения уравнения Больцмана 10–моментного грэдовского разложения функции распределения [7, 8, 12]. Это приближение справедливо в случае слабо неравновесных

струй. 13–моментное разложение метода Грэда позволяет продвинуться в область большей неравновесности и учесть вклад теплового потока [9]. Однако, учитывая результаты [16], естественно строить разложения функции распределения по полиномам Эрмита и Лагерра около эллипсоидальной функции распределения. Такие разложения для параллельной составляющей функции распределения использовались в [17, 18], а в случае полной функции распределения в [19–21]. Фактически это приводит к учету высокоскоростных “хвостов” функции распределения, которые могут давать значительный вклад в температуры, если определять их непосредственно как вторые моменты функции распределения, а не из ширины функции распределения на полувысоте. Особенно это касается перпендикулярной температуры [12, 16, 19, 20].

Представляет интерес использование асимптотических методов для решения систем моментных уравнений, соответствующих этим разложениям. Первым шагом при этом является применение таких методов в случае эллипсоидальной функции распределения, которая и обуславливает сложную структуру моментов интеграла столкновений. Учет добавки, представляемой как сумма полиномов Эрмита или Лагерра [18, 19], не должен приводить к принципиальным трудностям.

Цель настоящей работы заключается в применении метода сращивания асимптотических разложений к системе моментных уравнений, соответствующей эллипсоидальной функции распределения, и построении составных разложений, дающих достаточно точные аналитические выражения для расчета параметров струи на ее оси. Ранее такие решения строились для задачи о свободной струе, расширяющейся в затопленное пространство [22].

Функция распределения по скоростям $f(r, \vec{\xi})$ является решением уравнения Больцмана

$$\xi \frac{\partial f}{\partial r} + \frac{\rho^2}{r} \frac{\partial f}{\partial \xi} - \frac{\xi \rho}{r} \frac{\partial f}{\partial \rho} = \int (f' f'_1 - f f_1) g \sigma(g, \chi) d\Omega d\vec{\xi}_1, \quad (1)$$

где $g = |\vec{\xi} - \vec{\xi}_1|$ – относительная скорость частиц до столкновения, $\sigma(g, \chi) d\Omega$ – сечение рассеяния в системе центра масс в телесный угол $d\Omega = \sin \chi d\chi d\phi$. Штрихами отмечены функции распределения частиц после соударения, r – радиальная переменная, а $d\vec{\xi} = d\xi_r d\rho d\varepsilon$, ξ и ρ – составляющие вектора скорости вдоль и перпендикулярно r соответственно.

Макроскопические параметры струи представляют собой моменты функции распределения:

$$\begin{aligned} \langle m \rangle &= m, \quad \langle m\xi \rangle = mu, \quad \langle \frac{m\xi^2}{2} \rangle = \frac{1}{2} kT_{\parallel} + \frac{mu^2}{2}, \\ \langle \frac{m\rho^2}{2} \rangle &= kT_{\perp}, \quad \langle \xi \frac{m\xi^2}{2} \rangle = u(\frac{3}{2} kT_{\parallel} + \frac{mu^2}{2}), \\ \langle \xi \frac{m\rho^2}{2} \rangle &= ukT_{\perp}, \end{aligned} \quad (2)$$

где

$$n \langle \Psi \rangle = \int \Psi f d\vec{\xi}$$

m – масса атома, k – постоянная Больцмана, n – числовая плотность, u – средняя скорость течения, T_{\parallel} и T_{\perp} – параллельная и перпендикулярная кинетические температуры соответственно. Обобщенное уравнение переноса (моментов) получается умножением (1) на Ψ и интегрированием по всему пространству скоростей:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} (r^2 n \langle \xi \Psi \rangle) + \frac{n}{r} \langle \rho (\xi \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} - \rho \frac{\partial \Psi}{\partial \xi}) \rangle = I_{\Psi}, \quad (3)$$

где I_{Ψ} – момент от интеграла столкновений. Для его вычисления необходимо конкретизировать вид функции распределения. В дальнейшем полагаем ее эллипсоидальной:

$$f = n \left(\frac{m}{2\pi k T_{\parallel}} \right)^{1/2} \left(\frac{m}{2\pi k T_{\perp}} \right) \exp \left\{ -\frac{m}{2kT_{\parallel}} (\xi - u)^2 + \frac{m\rho^2}{2kT_{\perp}} \right\}.$$

Тогда, используя (2) и (3), получаем следующую систему моментных уравнений:

$$\begin{aligned} \Psi = m : \frac{d}{dr} (nur^2) &= 0, \\ \Psi = m\xi : mnu \frac{du}{dr} + \frac{d}{dr} (nkT_{\parallel}) + \frac{2nk}{r} (T_{\parallel} - T_{\perp}) &= 0, \\ \Psi = \frac{m\xi^2}{2} + \frac{m\rho^2}{2} : nu \frac{d}{dr} \left(\frac{3}{2} kT_{\parallel} + kT_{\perp} + \frac{mu^2}{2} \right) &= 0, \end{aligned} \quad (4)$$

$$\Psi = \frac{m\xi^2}{2} : \frac{1}{2} nu \frac{d}{dr} (kT_{\parallel}) + nkT_{\parallel} \frac{du}{dr} = I_{\frac{m\xi^2}{2}},$$

где

$$I_{\frac{m\xi^2}{2}} = \frac{\pi m}{8\sqrt{2}} n^2 \left(\frac{m}{2\pi k T_{\parallel}} \right)^{1/2} \left(\frac{m}{2\pi k T_{\perp}} \right) \int_0^1 (1 - 3t^2) dt \int_0^{\infty} g^5 \exp \left(-\frac{mg^2}{4kT_{eff}} \right) Q^{(2)}(g) dg, \quad (5)$$

$$T_{eff} = \frac{T_{\perp}}{1 - \lambda t^2}, \quad \lambda = \frac{T_{\parallel} - T_{\perp}}{T_{\parallel}}.$$

$Q^{(2)}(g) = 2\pi \int_0^{\pi} (1 - \cos^2 \chi) \sigma(g, \chi) \sin \chi d\chi$ – вязкостное сечение. В случае потенциала Леннарда–Джонса ($U(r) = 4\varepsilon [(\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^6]$, ε и σ – параметры потенциала) при низких энергиях имеем [23]:

$$Q^{(2)}(g) = Q_0 \left(\frac{4\varepsilon}{mg^2} \right)^{1/3} \sigma^2, \quad Q_0 = 5,928. \quad (6)$$

Свободная струя представляет собой сложный газодинамический объект, в котором реализуются все режимы течения от континуального (вблизи сопла) до почти свободномолекулярного (вдали от сопла). Обычные способы решения моментной системы (4)–(5) разложением по числу Кнудсена Kn_0 не применимы, поскольку оно меняется от малого значения (вблизи сопла) до большого (вдали от сопла). В этой ситуации используется искусственный прием: разбиение поля течения струи на внутреннюю область (вблизи сопла, где $Kn_0 \rightarrow 0$) и внешнюю область (вдали от сопла, где $Kn_0 \rightarrow \infty$).

Для потенциала Леннарда–Джонса такие решения системы (4)–(5) во внешней и внутренней областях были получены в [9]. Равномерно пригодное решение во всей области течения, так называемое составное разложение, получается сшиванием двух этих решений согласно методу срачивания асимптотических разложений [24]:

$$\Gamma = \Gamma_{внутр} + \Gamma_{внеш} - (\Gamma_{внутр})^{внеш},$$

где $\Gamma_{внутр}$ и $\Gamma_{внеш}$ – внутреннее и внешнее разложение, а $(\Gamma_{внутр})^{внеш}$ – внешний предел внутреннего разложения [9]. В нулевом приближении имеем:

$$\begin{aligned} u(r) &= 5^{1/2} \left(\frac{kT_0^0}{m} \right)^{1/2} w^{3/2}, \\ n(r) &= 0,1582 n_0^0 w^{-3/2} \left(\frac{r}{D} \right)^{-2}, \\ T_{\parallel(\perp)}(r) &= 6,577 T_0^0 Kn_0^{12/11} y_{\parallel(\perp)} + 0,2925 T_0^0 (1 - w) w^{-1} \left(\frac{r}{D} \right)^{-4/3}, \end{aligned} \quad (7)$$

где p_0^0 (атм), T_0^0 (К) – давление и температура в сопле, D (см) – диаметр сопла.

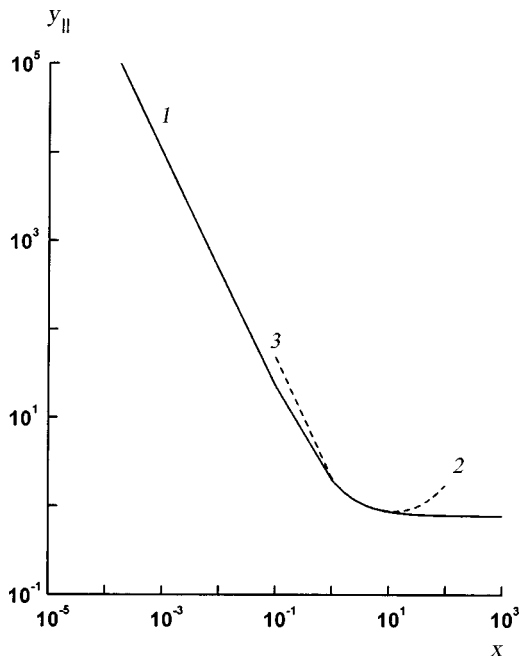


Рис. 1. Функция $y_{\parallel}(x)$ и ее асимптотики: 1 – y_{\parallel} (численное решение системы (8)); 2 – y_{\parallel}^0 ; 3 – y_{\parallel}^{∞}

Число Кнудсена Kn_0 определяется по условиям в сопле

$$Kn_0 = [6,229 \cdot 10^5 Q_0 (\frac{p_0^0 D}{T_0^0}) (\frac{\varepsilon}{k T_0^0})^{1/3} \sigma^2]^{-1}.$$

Здесь ε и σ – параметры потенциала Леннарда–Джонса. Кроме того, $w = w(z)$ – корень уравнения $w^4 - w + z^{-4/3} = 0$, принадлежащий интервалу $2^{-2/3} \leq w \leq 1$, причем $z = 2,514(r/D)$, а $y_{\parallel(\perp)}(x)$ удовлетворяют системе уравнений

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} x^2 \frac{dy_{\parallel}}{dx} &= \frac{y_{\perp}^{5/3}}{y_{\parallel}^{1/2}} \int_0^1 \frac{(1-3t^2) dt}{(1-\lambda_y t^2)^{8/3}}, \\ \frac{1}{2} x^2 \frac{dy_{\parallel}}{dx} + x^2 \frac{dy_{\perp}}{dx} + 2xy_{\perp} &= 0, \\ \lambda_y &= \frac{y_{\parallel} - y_{\perp}}{y_{\parallel}}. \end{aligned} \quad (8)$$

Для обычных в экспериментах со струями $r \geq 2,5D$, $w(z) \cong 1 - z^{-4/3}$ с точностью выше 0,5 %.

На рис. 1, 2 приведены зависимости $y_{\parallel}(x)$ и $y_{\perp}(x)$, полученные численным решением системы (8), и решения в виде рядов:

$$\begin{aligned} y_{\parallel}^0(x) &\cong x^{-4/3} (1 + 9,659 \cdot 10^{-1} x^{11/9} + 6,995 \cdot 10^{-3} x^{22/9}), \quad x \rightarrow 0, \\ y_{\parallel}^{\infty}(x) &\cong y_{\parallel}(\infty) + \frac{6}{5} y_{\parallel}^{7/6}(\infty) \frac{1}{x} + \frac{33}{50} y_{\parallel}^{4/3}(\infty) \frac{1}{x^2}, \quad x \rightarrow \infty \end{aligned} \quad (9)$$

и

$$\begin{aligned} y_{\perp}^0(x) &\cong x^{-4/3} (1 + 2,841 \cdot 10^{-2} x^{11/9} - 1,249 \cdot 10^{-3} x^{22/9}), \quad x \rightarrow 0, \\ y_{\perp}^{\infty}(x) &\cong \frac{3}{5} y_{\parallel}^{7/6}(\infty) \frac{1}{x} + \frac{33}{50} y_{\parallel}^{4/3}(\infty) \frac{\ln x}{x^2}, \quad x \rightarrow \infty, \end{aligned} \quad (10)$$

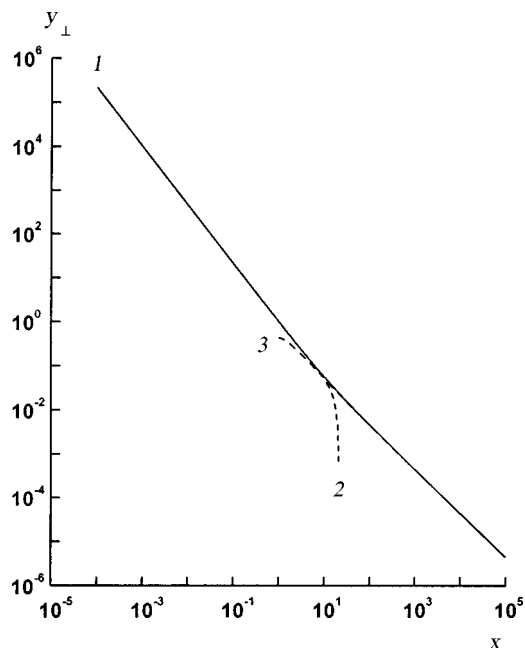


Рис. 2. Функция $y_{\perp}(x)$ и ее асимптотики: 1 – y_{\perp} (численное решение системы (8)); 2 – y_{\perp}^0 ; 3 – y_{\perp}^{∞}

где $y_{\parallel}(\infty) = 0,776$. Как видно на рисунках, для разложений при $x \rightarrow 0$ и при $x \rightarrow \infty$ имеются области перекрывания, допускающие следующие аппроксимации:

$$y_{\parallel}(x) \cong \begin{cases} y_{\parallel}^0(x), & x < 6, \\ y_{\parallel}^{\infty}(x), & x \geq 6 \end{cases}$$

с точностью выше 0,5% и

$$y_{\perp}(x) \cong \begin{cases} y_{\perp}^0(x), & x < 7, \\ y_{\perp}^{\infty}(x), & x \geq 7 \end{cases}$$

с точностью $\sim 7\%$.

Составные разложения сравнивали с численным решением нелинейной системы моментных уравнений (4) для аргона ($\varepsilon/k = 124$ К, $\sigma = 3,418$ Å) при $T_0^0 = 300$ К и разных $p_0^0 D$. Интегрирование (4) началось от $r = 2,5$. Начальные значения параметров струи рассчитывали из обычных непрерывных соотношений. Число Маха вычисляли по формуле Ашкеназа и Шермана [25].

Составные разложения обнаруживают малые отклонения от численного решения системы (4), тем меньшие, чем больше $p_0^0 D$. При этом в случае плотности и средней скорости при любых $p_0^0 D \geq 1,32 \cdot 10^{-3}$ атм·см отклонение нулевого приближения от численного решения системы (4) не превышает 1%. Для температур при $p_0^0 D \geq 6,58 \cdot 10^{-3}$ атм·см это отклонение не превышает 2% в нулевом приближении, а при $p_0^0 D = 1,32 \cdot 10^{-3}$ атм·см такая точность достигается только в первом приближении.

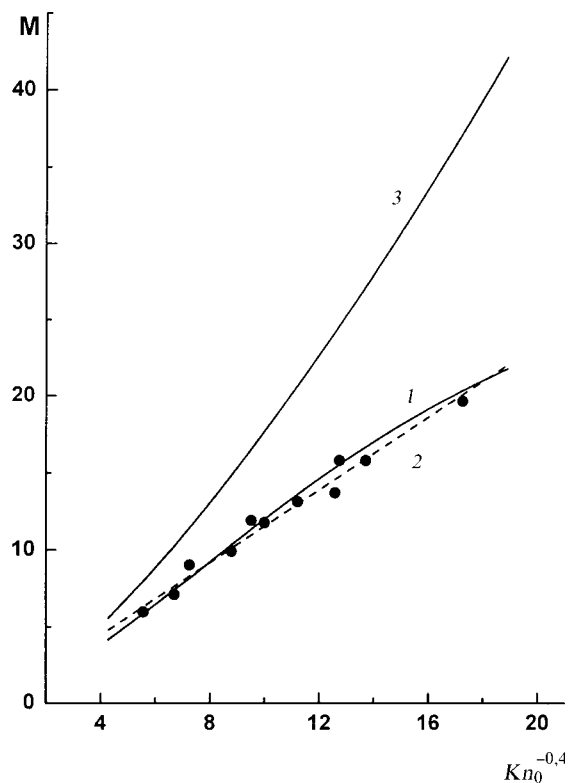


Рис. 3. Числа Маха в зависимости от $Kn_0^{-0,4}$: 1 – расчет с использованием формул (7); 2 – эмпирическая зависимость, полученная в [26]; 3 – предельное значение M_∞ ; символы – экспериментальные данные [26]

На рис. 3 приведена зависимость числа Маха $M(r) = u(r)/[5kT(r)/(3m)]^{1/2}$ от $Kn_0^{-0,4}$ для струи аргона, рассчитанная с использованием формул (7) (кривая 1) при $T_0^0 = 297$ К и $r/D = 33$. Для сравнения приведены экспериментальные данные (символы) и эмпирическая зависимость (кривая 2), полученные в [26]. Кривая 3 представляет зависимость предельного $M_\infty = (3 T_0^0 / T_{||\infty})^{1/2}$ числа Маха при $r \rightarrow \infty$ от $Kn_0^{-0,4}$. На рис. 4 приведены зависимости $T_{||}$ и T_{\perp} от r/D для струи аргона, рассчитанные по формулам (7) при $T_0^0 = 300$ К, $p_0^0 D = 2,026 \cdot 10^{-3}$ атм·см с $C_6 = 6 \cdot 10^{-59}$ эрг·см⁶ [3]. Представлены также экспериментальные данные [27] (символы). Зависимость числа Маха $M(r)$ от $p_0^0 D$ для струи аргона, рассчитанная с использованием (7), при $T_0^0 = 300$ К и $r/D = 39$ с $C_6 = 6 \cdot 10^{-59}$ эрг·см⁶ (кривая 1) и экспериментальные данные (символы) [27] приведены на рис. 5. Здесь же представлены результаты численных расчетов [27] (кривая 2) и зависимость M_∞ от $p_0^0 D$ (кривая 3). Во всех случаях обнаруживается хорошее согласие теории и эксперимента. Из рис. 3, 5 видно, что в экспериментальных измерениях предельные значения числа Маха достигаются не всегда, и отклонение уменьшается не только с увеличением r , но и с уменьшением $p_0^0 D$.

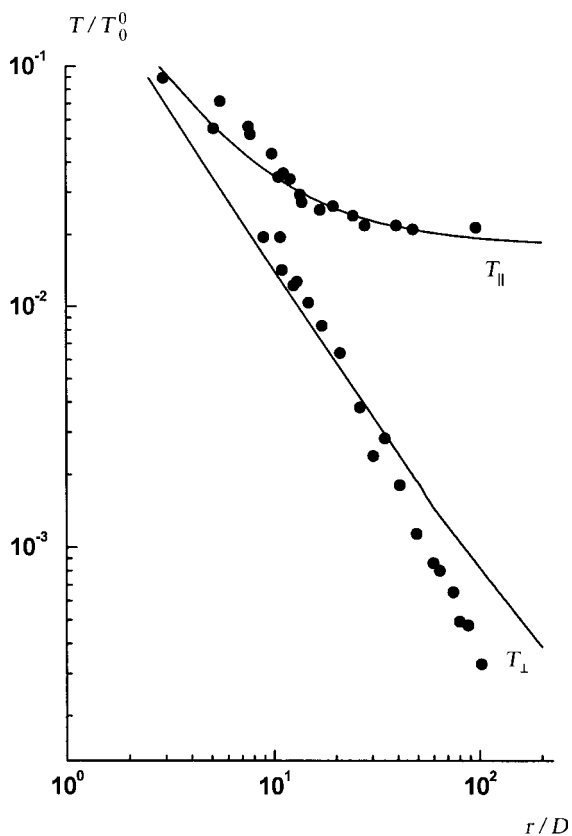


Рис. 4. Параллельные и перпендикулярные температуры в струе аргона, рассчитанные по формулам (7) при $T_0^0 = 300$ К и $p_0^0 D = 2,026 \cdot 10^{-3}$ атм·см (символы – экспериментальные данные [27])

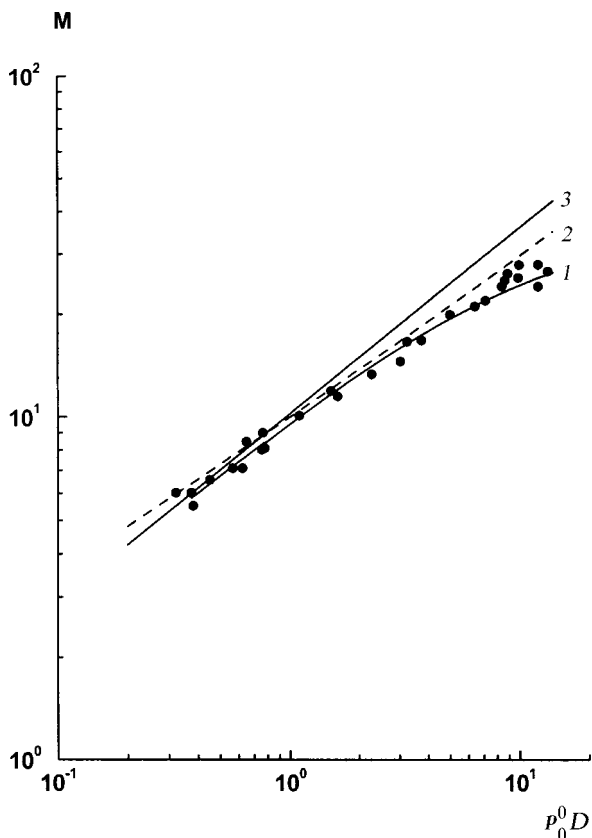


Рис. 5. Числа Маха в зависимости от $p_0^0 D$: 1 – расчет для струи аргона с использованием (7) при $T_0^0 = 300$ К и $r/D = 39$; 2 – численный расчет [27]; 3 – предельное значение M_∞ (символы – экспериментальные данные [27])

Выполненное сравнение показывает, что составные разложения, в которые входят универсальные функции $y_{\parallel}(x)$ и $y_{\perp}(x)$, не зависящие от условий течения и свойств газа, а зависящие лишь от формы потенциала взаимодействия, могут быть использованы для быстрой и достаточно точной оценки параметров струи во всем поле течения. Такие оценки полезны в экспериментах с молекулярными пучками и при теоретическом

рассмотрении задач, в которых поле течения мало возмущается процессами, протекающими в струе. Это, например, расширение смесей газов со следовыми концентрациями одного из компонентов или химические реакции, протекающие внутри ядра сверхзвуковой струи (см., например [28]). Они могут быть также полезны для оценки поступательных температур при изучении вращательной релаксации в струях [29].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Hamel B.B., Willis D.R. // Phys. Fluids. 1966. **9**. P. 829.
2. Knuth E.L., Fisher S. S. // J. Chem. Phys. 1968. **48**. P. 1674.
3. Miller D.R., Andres R.P. Proc. 6th Int. Symp. on Rarefied Gas Dynamics. N. Y., 1969. **2**. P. 1385.
4. Chen T.-Y. // Phys. Fluids. 1970. **13**. P. 317.
5. Cattolica R., Robben F., Talbot L., Willis D. R. // Phys. Fluids. 1974. **17**. P. 1793.
6. Toennies J.P., Winkelmann K. // J. Chem. Phys. 1977. **66**. P. 3965.
7. Кулезнев Е.В., Лазарев А.В., Трубников Д.Н. // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 2. Химия. 1987. **28**. С. 117.
8. Лазарев А.В., Кулезнев Е.В., Трубников Д.Н. // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 2. Химия. 1988. **29**. С. 157.
9. Трубников Д.Н. Дис. ... докт. хим. наук. М., 1992.
10. Randeniya L. K., Smith M. A. // J. Chem. Phys. 1990. **93**. P. 661.
11. Лазарев А. В., Жданов В. М., Застенкер Н.Н., Трубников Д.Н. // ПИМТФ. 1997. **38**. № 5. С. 65.
12. Habets A. H. M. Expansions of argon. Ph. D. Thesis. Eindhoven. 1977.
13. Лазарев А. В., Застенкер Н.Н., Трубников Д.Н. // Хим. физика. 2003. **22**. № 1. С. 10.
14. Thomas D. R. // AIAA Journal. 1971. **9**. P. 451.
15. Thomas D.R. // Carleton Mathematical Series. 1970. N 21.
16. Willis D.R., Hamel B.B., Lin J. T. // Phys. Fluids. 1972. **15**. P. 573.
17. Beijerinck H. C. W., Menger P., Verster N. F. Proc. 11th Int. Symp. on Rarefied Gas Dynamics. Paris, 1979. **2**. P. 871.
18. Engelhardt R., Lonenz Th., Bergmann K., Mietzner Th., Palczewski A. // Chem. Phys. 1985. **95**. P. 417.
19. Beijerinck H. C. W., Kaashoek G. H., Beijers J. P. M., Verheijen M. J. // Physica. 1989. **121C**. P. 425.
20. Klots C.E. // Chem. Phys. 1982. **67**. P. 75.
21. Nanby K. // Phys. Fluids. 1979. **22**. P. 99.
22. Brook J.W., Hamel B.B. // Phys. Fluids. 1972. **15**. P. 1898.
23. Beijerinck H. C. W., Verster F. N. // Physica. 1981. **111C**. P. 327.
24. Найфэ А. Методы возмущений. М., 1976.
25. Ashkenas H., Sherman F. S. Proc. 4th Int. Symp. on Rarefied Gas Dynamics. N.Y., 1966. **2**. P. 84.
26. Anderson J.B., Fenn J.B. // J. Chem. Phys. 1965. **8**. P. 780.
27. Abauf N., Anderson J. B., Andres R. P., Fenn J. B., Miller D. R. Proc. 5th Int. Symp. on Rarefied Gas Dynamics. N.Y., 1967. **2**. P. 1317.
28. Mazely T. L., Smith M. A. // J. Chem. Phys. 1988. **89**. P. 2048.
29. Koura K. // Phys. Fluids. 1982. **25**. P. 1346.

Поступила в редакцию 27.02.03

ANALYTICAL ESTIMATIONS OF PARAMETERS OF MONOATOMIC GAS FREE JET EXPANDING INTO VACUUM

A.V. Lazarev, N.N. Zastenker, D.N. Trubnikov

(Division of Physical Chemistry; e-mail: tdn@phys.chem.msu.ru)

The Boltzmann equation for spherical free jet expansions of monoatomic gases atoms of which interact with the Lennard—Jones potential was solved by the method of moments using the ellipsoidal distribution function. The method of matching of asymptotic expansions was applied for an analysis of the moment equations system. Composite expansions allowing sufficiently exact estimations of jet parameters over the entire flow field were constructed. In the case of an argon jet, the comparison with the experimental data was carried out.