

УТОЧНЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ МОДЕЛИ VSS ДЛЯ СЕЧЕНИЙ УПРУГИХ СТОЛКНОВЕНИЙ¹

Бечина А. И., студент 1 курса магистратуры, кафедра
гидроаэромеханики СПбГУ, anya_bechina@mail.ru

Кустова Е.В., профессор кафедры гидроаэромеханики СПбГУ, доктор
физико-математических наук, e.kustova@spbu.ru

Аннотация

В работе определяются параметры полного упругого сечения столкновения модели переменной мягкой сферы (VSS). В отличие от известных параметров, полученных другими авторами только с учетом сдвиговой вязкости, в данной работе параметры определяются с учетом двух интегралов столкновений в широком диапазоне температур. Интегралы столкновений вычисляются с помощью надежного феноменологического потенциала, который рекомендован для широкого диапазона температур. Также рассчитан интеграл столкновения $\Omega^{(2,2)}$ на основе экспериментальных данных по сдвиговой вязкости. Полученные параметры обеспечивают хорошее согласие с экспериментальными данными и дают лучшее совпадение с омега-интегралами, посчитанными при помощи феноменологического потенциала, чем известные параметры.

Введение

При моделировании потоков разреженного газа с числом Кнудсена от 0,1 до 10,0 используют метод прямого статистического моделирования Монте-Карло (ПСМ). Метод ПСМ основан на представлении газа множеством дискретных частиц, которые случайным образом сталкиваются друг с другом. Считается, что вероятность двойных столкновений намного больше, чем вероятность тройных или столкновений большего порядка, а сами столкновения происходят мгновенно. Межмолекулярные столкновения рассчитываются с помощью молекулярных моделей: твердые сферы (HS), переменные твердые сферы (VHS) [1] и переменные мягкие сферы (VSS) [2].

Молекулярная модель переменной мягкой сферы была введена для того, чтобы обеспечить соответствие коэффициентов вязкости и

¹ Исследование выполнено при поддержке РФФИ, проект 19-11-00041.

диффузии обратно-степенному потенциалу или потенциалу Леннарда-Джонса (LJ). Модель VSS имеет почти такую же аналитическую и вычислительную простоту, что и модель переменной твердой сферы, поэтому она широко применяется в моделировании потоков разреженного газа методом ПСМ. Недостатком модели является то, что ее параметры обычно подгоняются по экспериментальным данным, доступным лишь при низких температурах (до 1000 К), а в реальных течениях возможны заметно более высокие температуры.

Целью данной работы является определение параметров модели переменной мягкой сферы, которые обеспечивают хорошее согласие со всеми коэффициентами переноса: вязкостью, теплопроводностью и диффузией для диапазона температур 200-20000 К.

Модель переменной мягкой сферы

Модель VSS определяет полное сечение упругого столкновения $\sigma_{VSS}(\epsilon)$ в виде [2]

$$\sigma = C(\epsilon)^{-\omega}, \quad (1)$$

где C и ω — параметры модели, ϵ — относительная энергия до столкновения.

Параметры модели переменной мягкой сферы обычно определяются из интегралов столкновений, рассчитанных с помощью модельных потенциалов, предоставленных Каблей и Мейсоном [4] в диапазоне температур 300-15000 К, а также определяются из коэффициентов вязкости, рекомендованных Мейтлендом и Смитом [5] для распространенных сортов газа в диапазоне низких (20-300 К) и высоких (300-2000 К) температур. Значения параметров сечения для некоторых газов представлены в таблице 1 [3].

| Столкновение | ω | $C, \text{ м}^2$ |
|--------------|----------|------------------------|
| $N_2 - N_2$ | 0.235 | $216.1 \cdot 10^{-20}$ |
| $O_2 - O_2$ | 0.201 | $155.6 \cdot 10^{-20}$ |
| $NO - NO$ | 0.221 | $187.6 \cdot 10^{-20}$ |

Таблица 1: Константы для расчета модели VSS

Интегралы столкновений

Поскольку для широкого диапазона температур нет достоверных экспериментальных данных для определения параметров ω , C , используются интегралами столкновений, рассчитанными по модельным потенциалам. Модель, предложенная в [4], к настоящему времени несколько устарела. Более надежным является феноменологический потенциал [6], который рекомендован для широкого диапазона условий (до 100000 K). С помощью этого потенциала в данной работе были рассчитаны интегралы столкновений разного порядка:

$$\Omega_{(cd)}^{(l,r)} = \left(\frac{2\pi kT}{m_{cd}} \right)^{(1/2)} \int_0^\infty \int_0^\pi \exp(-\gamma^2) \gamma^{2r+3} (1 - \cos^l(\chi)) \sigma(\gamma, \chi) \sin \chi d\chi d\gamma. \quad (2)$$

Здесь χ – угол рассеяния, k – постоянная Больцмана, m_{cd} – приведенная масса частиц сортов c и d , $\gamma^2 = \epsilon/kT$ – безразмерная относительная энергия, T – температура газа. В частности, были вычислены интегралы (1,1) и (2,2).

Для модели VSS омега-интегралы определяются следующим образом:

$$\Omega^{(1,1)} = \left(\frac{kT}{2\pi m_{cd}} \right) \int e^{-\gamma^2} \gamma^5 \sigma_{VSS}(\epsilon) d\gamma = \left(\frac{k}{8\pi m_{cd}} \right) CT^{0.5-\omega} \Gamma(3-\omega), \quad (3)$$

$$\Omega^{(2,2)} = \left(\frac{kT}{2\pi m_{cd}} \right) \int e^{-\gamma^2} \gamma^7 \sigma_{VSS}(\epsilon) d\gamma = \left(\frac{k}{8\pi m_{cd}} \right) CT^{0.5-\omega} \Gamma(4-\omega). \quad (4)$$

Также интеграл $\Omega^{(2,2)}$ может быть рассчитан из экспериментальных данных по коэффициентам сдвиговой вязкости η [7]

$$\Omega^{(2,2)} = \frac{5kT}{8\eta}. \quad (5)$$

С помощью регрессионного анализа по полученным интегралам были рассчитаны уточненные параметры сечений столкновения для модели переменной мягкой сферы. Для столкновений $N_2 - N_2$, $O_2 - O_2$ и $NO - NO$ были получены новые значения, которые представлены в таблице 2. На рисунках сравниваются омега-интегралы, посчитанные по новым параметрам, с интегралами, посчитанными по прежним параметрам и по модели [6].

Из рисунков видно, что омега-интегралы, полученные по уточненным параметрам, лучше согласуются с экспериментом и моделью

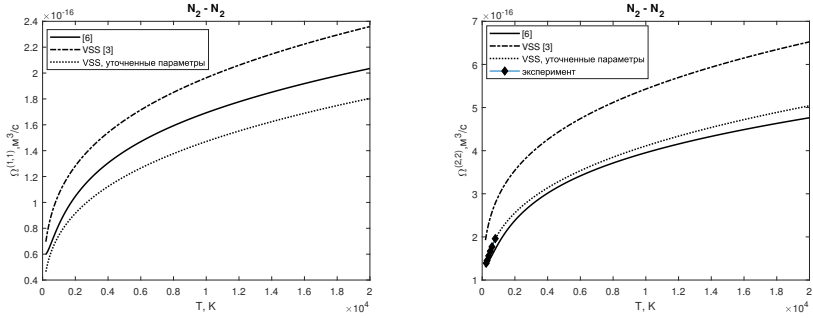


Рис. 1: Омега-интегралы как функция температуры для столкновения молекул N_2

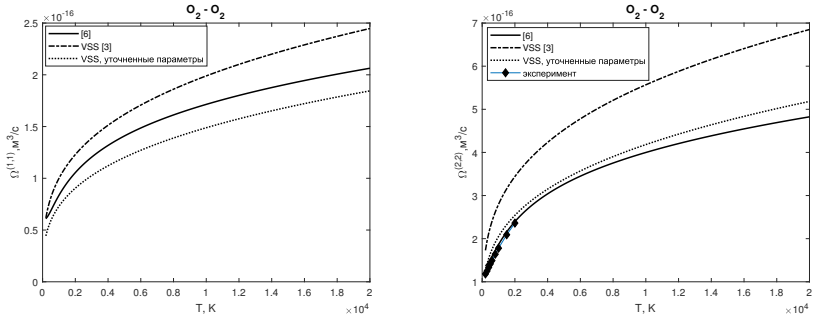


Рис. 2: Омега-интегралы как функция температуры для столкновения молекул O_2

[6]. Наибольшее отклонение от феноменологической модели составляет 38% для интеграла $\Omega^{(1,1)}$ для столкновения $O_2 - O_2$. Наибольшее отклонение от эксперимента составляет 15% (также для столкновения $O_2 - O_2$). Наилучшее согласие получено для взаимодействия $N_2 - N_2$, для которого максимальное отклонение от эксперимента составляет 2%. Дальнейшее уточнение параметров возможно при использовании в регрессионном анализе интегралов более высокого порядка.

Заключение

В работе проведено уточнение параметров VSS модели с помощью нового феноменологического потенциала взаимодействия молекул. По-

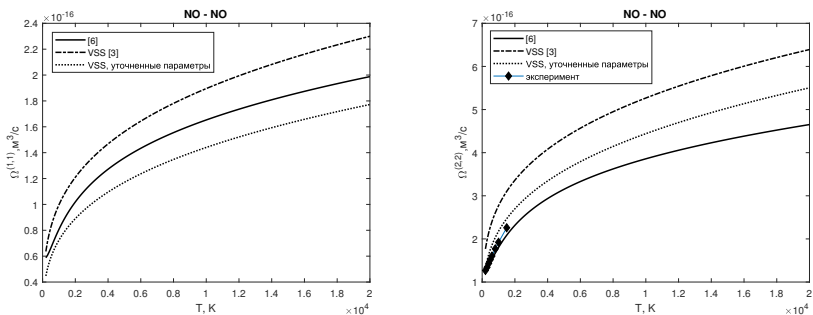


Рис. 3: Омега-интегралы как функция температуры для столкновения молекул NO

| Столкновение | ω | $C, \text{м}^2$ |
|--------------|----------|------------------------|
| $N_2 - N_2$ | 0.205 | $120.3 \cdot 10^{-20}$ |
| $O_2 - O_2$ | 0.191 | $104.8 \cdot 10^{-20}$ |
| $NO - NO$ | 0.191 | $116.6 \cdot 10^{-20}$ |

Таблица 2: Уточненные константы для расчета модели VSS

лученные параметры обеспечивают хорошее совпадение интегралов столкновений с экспериментом и могут быть рекомендованы для использования при моделировании течений методом ПСМ.

Литература

- [1] *Bird G. A.* Monte-Carlo simulation in an engineering context // Prog. Astronaut. Aeronaut. 1981. Vol. 74. P. 239–255.
- [2] *Koura K., Matsumoto H.* Variable soft sphere molecular model for inverse-power-law or Lennard-Jones potential // Phys. Fluids A. 1991, Vol. 3. P. 2459–2465.
- [3] *Koura K., Matsumoto H.* Variable soft sphere molecular model for air species // Phys. Fluids A. 1992. Vol 4. P. 1083–1085.

- [4] *S. J. Cubley and E. A. Mason* Atom-molecule and molecule-molecule potentials and transport collision integrals for high-temperature air species// *Phys. Fluids*. 1975. Vol 18. P. 1109.

- [5] *G. C. Maitland and E. B. Smith* Critical reassessment of viscosities of 11 common gases// *J. Chem. Eng. Data*. 1972. Vol. 17. P. 150.

- [6] *D. Bruno, M. Capitelli, C. Catalfamo, R. Celiberto, G. Colonna, P. Diomede, D. Giordano, C. Gorse, A. Laricchiuta, S. Longo, D. Pagano, and F. Pirani* Transport properties of high-temperature Mars-atmosphere components. ESA STR 256// Noordwijk: ESA Publications Division. 2008

- [7] *Vargaftick N.B.* Tables on the thermophysical properties of liquids and gases// New York: Halsted Press. 1975