

**ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ
МОЛЕКУЛЯРНОГО ПОТОКА ОТ ТОЧЕЧНОГО ИСТОЧНИКА
СО СПЛОШНОЙ СРЕДОЙ****Б. Л. Паклин, А. К. Ребров**Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН,
630090 Новосибирск*

В работе представлены результаты вычислительного моделирования трансформации молекулярного пучка в диффузионное течение. В качестве основной характеристики релаксационной зоны введено понятие релаксационной длины L_r . Количественный анализ для модельных молекул в виде твердых сфер в практически интересном диапазоне отношения молекулярных масс источника и среды m_1/m_2 и скоростных отношений S вскрыл особенности релаксационного процесса. Поставленная общая проблема молекулярного источника в сплошном течении в настоящее время открыта для тщательного исследования.

Постановка задачи. Фундаментальные теоретические результаты поступательной релаксации молекулярного ансамбля хорошо известны для однородной релаксации и релаксации в ударных волнах. Движение молекулярного пучка, инжектированного в фоновый газ с некоторым заданным состоянием, представляет собой особый объект для изучения поступательной релаксации с точки зрения преобразования пучка в диффузионное течение — распада (деградации) инерционного движения молекул. Элементы таких процессов имеют место в ударных волнах газовых смесей, но они завуалированы коллективными явлениями релаксации газовых смесей. В общей постановке можно формулировать проблему релаксации газа молекулярного источника в сплошном потоке. Более общая постановка задачи охватывает проблемы континуальной газовой динамики и кинетической теории газов. К исследованиям этого направления можно отнести работу [1], где распад молекулярного пучка изучался в аспекте проникновения тяжелых молекул в легкий фоновый газ. В расширительном смысле можно указать и на исследования кинетики испарения (конденсации) [2].

Практическое приложение описание релаксации газа от молекулярного источника может найти в различных вакуумных технологиях: напыление, локализованный распыл, смешение и разделение газов, получение ультрадисперсных частиц. Формирование факелов ракетных двигателей на больших высотах относится к явлениям той же природы.

В данной работе распад молекулярного пучка изучался в линейной постановке, т. е. без учета столкновений инжектируемых молекул между собой. Вычислительные эксперименты выполнены методом Монте-Карло для отношения молекулярных масс инжектируемых и фоновых молекул в диапазоне $1 \gg m_1/m_2 \div m_1/m_2 \gg 1$ при скоростном отношении S от 0 до ∞ , определенном по наиболее вероятной скорости фонового газа. Алгоритм этого подхода описан в [3].

Общей и очевидной характеристикой релаксационных процессов молекулярного пучка является наличие существенно неравновесной зоны в пространстве, окружающем пучковый источник. В этой зоне функция распре-

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 93-013-17553).

деления инжектируемых молекул по скоростям трансформируется в функцию распределения, соответствующую равновесной функции распределения при температуре фонового газа. Функция распределения скоростей фонового газа предполагалась невозмущенной и равновесной (максвелловской). Расчеты проводились для простой модели межмолекулярных столкновений — твердых сфер. В результате систематических вычислительных экспериментов были получены данные по топологии релаксационной зоны, по расположению фиктивного точечного источника инжектируемых молекул, играющего роль полюса их диффузионного дрейфа в бесконечность. В случае, когда молекулы источника имеют изотропное максвелловское распределение по скоростям (с нулевой среднемассовой скоростью), решение является таким же, как для процесса молекулярного истечения в среду, подчиняющегося уравнению диффузии во всем пространстве, за исключением релаксационной зоны в окрестности источника.

Предположим, что молекулы точечного источника инжектируются в фоновый газ в выделенном направлении с некоторой функцией распределения по скоростям и что на бесконечности происходит сферический дрейф молекул от источника с фиктивным центром, смещенным относительно реального выхода из источника. Для характеристики смещения ниже вводится в качестве длины релаксации понятие среднего расстояния распада инерционного движения молекул L_r . Согласно [4, 5], эта длина есть расстояние, на котором реализуется персистенция энергии и импульса.

Длина релаксации энергии инжектируемых молекул была определена как средний путь, на котором ими достигается средняя энергия, соответствующая температуре фонового газа, а длина релаксации импульса — как средний путь молекул, на котором компонента скорости, параллельная направлению инъекции, изменяет свой знак. От длины релаксации зависит расположение точечного диффузионного источника.

Анализ вычислительных экспериментов. Основными параметрами, от которых может зависеть длина релаксации, являются

молекулярная масса источника m_1 и фонового газа m_2 , скорость инъекции V , направленная вдоль оси источника, а также наиболее вероятная скорость фонового газа u .

Для исследования зависимости L_r от этих величин естественно использовать безразмерные параметры m_1/m_2 и $S = V/u$. Величина $l = 1/n\sigma$ служит в качестве единицы длины (n — числовая плотность молекул фонового газа, σ — сечение столкновения для взаимодействия молекул двух видов). Для модели взаимодействия молекул как твердых сфер $\sigma = \pi(r_1 + r_2)^2$ (r_1 и r_2 — радиусы молекул источника и фонового газа). Единицей времени служит величина $t = l/u$. Функция распределения инжектируемых молекул по скоростям соответствовала δ -функции.

Рис. 1 иллюстрирует осредненный поток молекул от источника после инъекции их вдоль оси ординат. При этом функция распределения молекул по скоростям задана

как δ -функция, скоростное отношение, определенное по наиболее вероятной скорости фонового газа, $S = 5$, отношение масс $m_1/m_2 = 10$. Линии тока представлены для инъекции и релаксации в некотором цилиндриче-

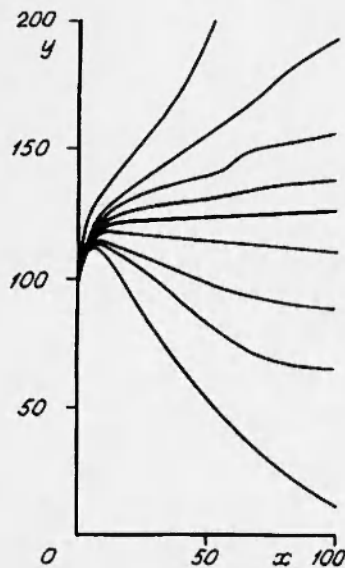


Рис. 1

ском пространстве с поглощающими поверхностями для инжескированного газа. Этот рисунок наглядно показывает деградацию направленного движения молекул в области, определяемой длиной релаксации (в данном случае $L_r = 20$).

Процедура моделирования длины релаксации средней кинетической энергии молекул источника к равновесной кинетической энергии фонового газа состоит в следующем. Моделируется достаточно большое число траекторий молекул с помощью метода Монте-Карло. В определенные моменты времени для каждой молекулы находились величина кинетической энергии, а также расстояние по оси от источника. После этого для всех молекул определялись средняя кинетическая энергия как функция времени, а также зависимость от времени среднего расстояния молекул от источника. В момент времени, когда разница между средней кинетической энергией фонового газа и рассчитанной кинетической энергией молекул источника становится пренебрежимо малой, среднее расстояние ансамбля молекул от источника принимается за величину L_r , определяющую размер релаксационной зоны и выступающую в качестве характеристики релаксации кинетической энергии для данного молекулярного источника.

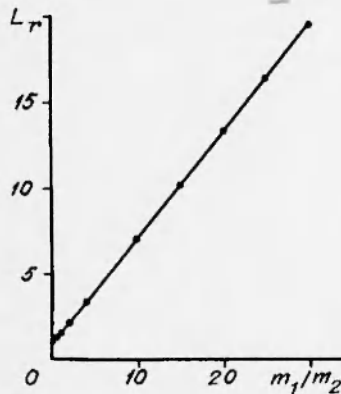


Рис. 2

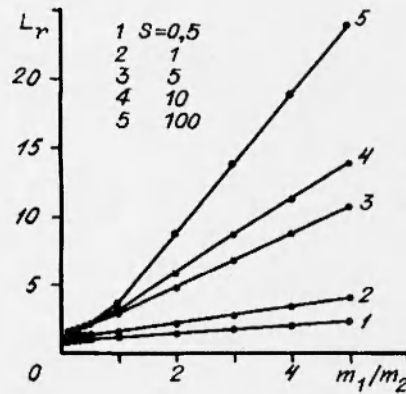


Рис. 3

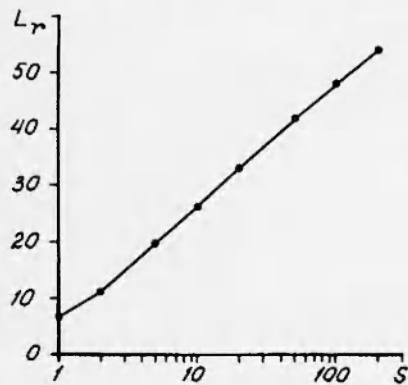


Рис. 4

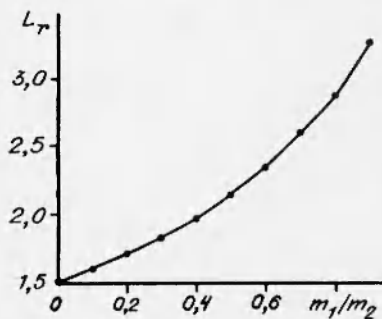


Рис. 5

Зависимость L_r от молекулярного отношения m_1/m_2 при $S = 1$ представлена на рис. 2. Видно, что функция L_r линейна, начиная со значений $m_1/m_2 > 1$ при фиксированной величине S . Асимптотическое поведение L_r наблюдается для любого значения S (рис. 3). Зависимость L_r от скоростного отношения S при $m_1/m_2 = 10$ в этой области ($m_1/m_2 > 1$) имеет логарифмический характер (рис. 4).

Для малых значений m_1/m_2 функция L_r изменяется в узких пре-

делах при любых значениях S . Следует отметить другие интересные особенности поведения длины релаксации. В области $m_1/m_2 < 1$, если $S \rightarrow \infty$, L_r стремится к некоторому пределу. Предельная кривая показана на рис. 5. В качестве примера на рис. 6 приведена зависимость L_r от S при $m_1/m_2 = 0,1$. При $m_1/m_2 \rightarrow 0$ предельное значение $L_r \rightarrow 1,5$. Для $S < 0,5$ $L_r < 1$. Эта тенденция очевидна, поскольку для $S = 0$ $L_r = 0$.

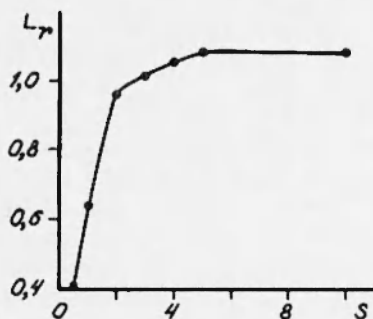


Рис. 6

Изменение смещения эффективного источника при $m_1/m_2 \rightarrow 0$ с изменением S не будет проявлением инерционных эффектов. Дело в том, что медленные молекулы в среднем начинают свой столкновительный процесс ближе к источнику. Можно ожидать, что при инъекции газа с функцией распределения, отличающейся от δ -функции, газ вблизи источника более холодный.

При определении среднего расстояния, характеризуемого полной потерей начального импульса, моделирование траекторий отдельных молекул проводилось методом Монте-Карло вплоть до столкновений, когда знак компоненты скорости вдоль оси изменялся. Средняя величина этого расстояния по всем молекулам рассматривалась как длина релаксации для момента количества движения. Интересным обстоятельством оказалось то, что длина релаксации для момента количества движения с погрешностью в пределах статистического разброса равна длине релаксации для кинетической энергии ансамбля моделируемых молекул. Важным следствием этого факта является то, что зависимости для длины релаксации по кинетической энергии (рис. 2-6) справедливы также и для релаксации по моменту количества движения.

Любой источник, расположенный в бесконечном пространстве покоящегося фонового газа, способен быть источником сферически-симметричного потока, подчиняющегося диффузионному закону. Проблема состоит в том, чтобы найти правильное положение фиктивного источника. Вышеизложенный анализ отвечает на этот вопрос.

ЛИТЕРАТУРА

1. Anderson J. B. Low particle energy range // J. Chem. Phys. 1975. V. 63, N 4. P. 1504-1512.
2. Sugimoto H., Sone Y. Numerical analysis of steady flows of a gas evaporating from its cylindrical condensed phase on the basis of kinetic theory // Phys. Fluids A. 1992. V. 4, N 2. P. 419-440.
3. Paklin B. L. A new Monte-Carlo algorithm of linear approach for gas dynamic problems // 19th Int. Symp. on Rarefied Gas Dynamics: Book of Abstr. Oxford, 1994.
4. Grad H. Theory of Rarefied Gases // Proc. of the 1st Int. Symp. on Rarefied Gas Dynamics. N. Y.: Pergamon Press, 1960. P. 100-138.
5. Hamel B. B. Disparate mass mixture flows // 10th Int. Symp. on Rarefied Gas Dynamics: Techn. Pap. N. Y., 1977. P. 171-195.

Поступила в редакцию 31/X 1994 г.