

Равномерная сходимость функции угла рассеяния в газовых смесях

Проведен анализ равномерной сходимости по параметрам ключевой функции из молекулярно-кинетической теории – функции угла рассеяния взаимодействующих молекул, – которая используется в вычислительных технологиях определения коэффициентов переноса сред по методу Чепмена – Энскога. Анализ позволит обоснованно определять расчетные значения коэффициентов переноса в газовых смесях в двухуровневом численном моделировании задач газодинамики, сочетающих описание макропроцессов на основе макроуравнений тепломассопереноса с микроскопическим описанием на базе уравнения Больцмана.

И.В. АНИСИМОВА,
д-р физ.-мат. наук,
В.Н. ИГНАТЬЕВ,
д-р физ.-мат. наук
(КНИТУ-КАИ, Казань)
anisimovaiv1@rambler.ru

Уравнения тепломассопереноса, переносные характеристики среды, уравнение Больцмана, несобственные кратные интегралы, кубатурные формулы Гаусса – Кристоффеля

В настоящее время совершенствуется численное моделирование процессов, использующих в качестве рабочей среды жидкость или газ, оптимизация режимов их работы [1, 2]. Такие расчеты практически невозможно выполнить без данных о свойствах среды. Одна из важнейших теплофизических характеристик – свойства переноса (диффузии, вязкости, теплопроводности), причем качество результатов численного моделирования зависит от достоверности этих данных. Использование точных данных о свойствах переноса повышает энергоэффективность за счет снижения затрат топлива, электроэнергии, металла, капитальных затрат. Часто для решения актуальных задач математического моделирования необходимо знать свойства среды на молекулярном уровне, которые определить невозможно даже при современном уровне экспериментальной техники. Так, термодиффузию, самодиффузию и некоторые другие коэффициенты переноса среды экспериментальным способом определить пока не удастся. Однако на основе их значений можно объяснить некоторые природные эффекты, например снижение термодинамического сопротивления в задачах аэрогидродинамики. В таких случаях важно правильно оценить возможности теоретических методов. Поскольку на значения транспортных характеристик среды влияют микропроцессы, для определения их значений используется молекулярно-кинетическая теория газов, в частности уравнение Больцмана [3–6]. Правая столкновительная часть уравнения Больцмана содержит кратные несобственные интегралы, значения которых используются в вычислительном алгоритме определения коэффициентов переноса [3, 4]. Один из таких интегралов содержит осциллирующую подынтегральную параметрическую функцию, поэтому для определения его значений необходимо использовать специальные математически обоснованные квадратуры [7]. Кроме того, в подынтегральное выражение входит функция угла рассеяния взаимодействующих молекул. Проведем анализ свойств данной функции, содержащей несобственный интеграл. Этот анализ позволит обоснованно определять расчетные значения коэффициентов переноса в средах, исходя из первого принципа молекулярно-кинетической теории газов, при численном моделировании задач механики жидкости и газа на основе макроуравнений тепломассопереноса.

Столкновительная часть уравнения Больцмана из молекулярно-кинетической теории газов содержит несобственные интегралы, сходимость которых, как правило, не анализируется. Функция угла рассеяния молекул выражается через такой интеграл и имеет вид [3, 4, 6]:

$$\chi(b, g) = \pi - 2b \int_{r_0}^{\infty} \frac{dr}{r^2 \sqrt{1 - \varphi_{\text{eff}}/g^2}}, \quad (1)$$

где приведенный прицельный параметр b , приведенная кинетическая энергия относительного движения g , приведенное межмолекулярное расстояние r – безразмерные переменные. Несобственный интеграл (1) содержит функционал $\varphi_{\text{eff}}(r, b, g)$ – приведенный межмолекулярный потенциал, кото-

рый описывает динамику парных столкновений молекул с диаметрами d_1 , d_2 и определяется выражением [3–6]

$$\varphi_{\text{eff}}(r, b, g) = \varphi(r) + \left(\frac{bg}{r}\right)^2. \quad (2)$$

Потенциал (2) состоит из суммы потенциала межмолекулярного столкновения [6]

$$\varphi(r) = f(n) \left[\left(\frac{AI}{r}\right)^{2(n+3)} - \left(\frac{AI}{r}\right)^6 \right] \quad (3)$$

и потенциала, обусловленного центробежными силами $(bg/r)^2$. В формуле (3) AI – безразмерный параметр, который определяется равенством [6]

$$AI = \frac{2\sigma}{(d_1 + d_2)}. \quad (4)$$

В выражении (4) параметр σ определяет значение расстояния r между молекулами, при котором потенциал взаимодействия $\varphi(r) = 0$, функция $f(n)$ определяется выражением (4):

$$f(n) = \left(\frac{n+3}{3}\right)^{3/n} \left/ \left(1 - \left(\frac{n+3}{3}\right)^{-1}\right)\right.$$

Выражение (2) обобщает известные потенциалы, описывающие процессы взаимодействия молекул в газах [8, 9]. Так, при $n = 3$ из выражения (2) получается потенциал (6–12) Леннарда – Джонса. Обобщенный потенциал (2) описывает динамику парных столкновений молекул в инертных газовых средах. Также им можно пользоваться и в полярных газовых средах, если к выражению (2) присоединить поправку Штокмайера [4], учитывающую влияние внутренних сил молекул на процесс их взаимодействия.

Значение функции угла рассеяния молекул (1) $\chi(b, g)$ используется в других кратных несобственных интегралах из столкновительной части уравнения Больцмана, в которых интегрирование осуществляется по параметрам b , g .

Рассмотрим в трехмерном множестве $D \times [r_0; \infty)$ функцию $f(x, r)$, зависящую от параметров $x = (b; g)$, где $x \in D$ ($D = [0; b^*] \times [0; g^*]$) – замкнутое ограниченное множество. Пусть для $\forall x \in D$ существует интеграл

$$I(x) = \int_{r_0}^{\infty} f(x, r) dr. \quad (5)$$

Так как по определению несобственного интеграла

$$\int_{r_0}^{\infty} f(x, r) dx = \lim_{A \rightarrow \infty} \int_{r_0}^A f(x, r) dr, \quad (6)$$

то интеграл

$$F(A, x) = \int_{r_0}^A f(x, r) dr \quad (7)$$

представляет собой функцию от A и x и при $x = \text{const}$ и $A \rightarrow \infty$ имеет пределом $I(x)$. Согласно работам [10, 11] интеграл (5) называется равномерно сходящимся относительно $x \in D$, если для $\forall \varepsilon > 0$ найдется такое не зависящее от x число $A_0 \geq r_0$, что лишь только $A > A_0$, то неравенство

$$\left| \int_{r_0}^{\infty} f(x, r) dr - \int_{r_0}^A f(x, r) dr \right| = \left| \int_A^{\infty} f(x, r) dr \right| < \varepsilon$$

будет выполняться одновременно для всех значений $x \in D$.

Установим признак, по которому можно определить равномерную сходимость интеграла (5). Рассмотрим несобственный интеграл

$$\int_{r_0}^{\infty} f_1(r) f_2(x, r) dr, \quad (8)$$

в котором подынтегральная функция состоит из произведения двух функций.

Лемма. Если в интеграле (8):

1) функция $f_1(r) \in C[r_0, \infty)$, и сходится несобственный интеграл

$$\int_{r_0}^{\infty} f_1(r) dr; \quad (9)$$

2) функция $f_2(x, r) \in C^1[r_0, \infty)$ и равномерно ограничена по параметрам x , т. е.

$$|f_2(x, r)| \leq L \quad (L - \text{const}), \quad (10)$$

то несобственный интеграл (8) равномерно сходится.

Доказательство. Проинтегрируем (8) методом по частям. При любом $A_1 > A > r_0$ справедливо

$$\int_A^{A_1} f_1(r) f_2(x, r) dr = \varphi(A_1) f_2(x, A_1) - \varphi(A) f_2(x, A) - \int_A^{A_1} \varphi(r) (f_2(x, r))'_r dr. \quad (11)$$

Здесь $\varphi(r) = \int_{r_0}^r f_1(t) dt$.

Применим теорему о среднем для интеграла в правой части выражения (11):

$$\int_A^{A_1} \varphi(r) (f_2(x, r))'_r dr = \varphi(\xi) (f_2(x, A_1) - f_2(x, A)), \quad (12)$$

где $\xi \in (A, A_1)$. С учетом формулы (12) выражение (11) примет вид

$$\int_A^{A_1} f_1(r) f_2(x, r) dr = (\varphi(A_1) - \varphi(\xi)) f_2(x, A_1) + (\varphi(\xi) - \varphi(A)) f_2(x, A). \quad (13)$$

В силу предположения 2 леммы для функции $f_2(x, r)$ множители в правой части формулы (13) являются ограниченными. Первые множители в правой части могут быть сделаны меньше $\frac{\varepsilon}{2L}$ за счет выбора величин A, A_1 . Пусть найдется такое A_0 , что при $A_1 > A > A_0$ имеет место

$$|(\varphi(A_1) - \varphi(\xi)) f_2(x, A_1) + (\varphi(\xi) - \varphi(A)) f_2(x, A)| < \varepsilon. \quad (14)$$

Одновременно для всех параметров x обеспечивается равномерная сходимость несобственного интеграла (8), т. е.

$$\left| \int_{r_0}^{\infty} f_1(r) f_2(x, r) dr \right| < \varepsilon. \quad (15)$$

Теорема 1. Функция угла рассеяния молекул $\chi(b, g)$, определенная выражением (1), является равномерно непрерывной по параметрам b, g на множестве $D \times [r_0; \infty)$ ($D = [0; b^*] \times [0; g^*]$) и принимает значения на множестве действительных чисел R при условии

$$g^2 > \varphi_{\text{eff}}^* \quad \forall r \in [r_0, \infty). \quad (16)$$

Доказательство. При доказательстве теоремы 1 воспользуемся результатами леммы. Для этого обозначим параметры $x = (b; g)$ и подынтегральную функцию в несобственном интеграле (1) представим в виде произведения двух функций – $f_1(r) = \frac{1}{r^2}$ и $f_2(x, r) = \frac{b}{\sqrt{1 - \Phi_{\text{eff}}^*/g^2}}$. Функция $\chi(x)$ будет равномерно сходящейся по параметрам x , если несобственный интеграл $\int_{r_0}^{\infty} f_1(r) dr$ будет сходиться, а функция $f_2(x, r) \in C^1[r_0, \infty)$ и равномерно ограничена по параметрам x .

Рассмотрим

$$\int_{r_0}^{\infty} f_1(r) dr = \int_{r_0}^{\infty} \frac{dr}{r^2} = \frac{1}{r_0}. \quad (17)$$

Отсюда следует, что несобственный интеграл $\int_{r_0}^{\infty} f_1(r) dr$ сходится. Непрерывность $f_1(r)$ и $f_2(x, r)$ и дифференцируемость $f_2(x, r)$ по r следует из степенного типа этих функций, а также условия (16).

Докажем равномерную ограниченность функции $f_2(b, g, r)$ по параметрам x при выполнении условия (16), которое запишем в виде

$$g^2 > \varphi + \left(\frac{bg}{r}\right)^2$$

или

$$b < r \left(1 - \frac{\varphi}{g^2}\right)^{1/2}; \quad \forall r \in [r_0, \infty). \quad (18)$$

Для $\forall r \in [r_0, \infty)$ из неравенства (18) получаем:

$$\lim_{g \rightarrow \infty} \frac{b}{r} < \lim_{g \rightarrow \infty} \sqrt{1 - \frac{\varphi}{g^2}} = 1. \quad (19)$$

С учетом неравенства (19) для функции $f_2(b, g, r)$ в $D \times [r_0; \infty)$ справедлива оценка:

$$\lim_{\substack{b \rightarrow \infty \\ g \rightarrow \infty}} f_2(b, g, r) = \lim_{\substack{b \rightarrow \infty \\ g \rightarrow \infty}} \frac{b}{\sqrt{1 - \frac{\Phi_{\text{eff}}}{g^2}}} < \lim_{\substack{b \rightarrow \infty \\ g \rightarrow \infty}} \frac{r \sqrt{1 - \frac{\varphi}{g^2}}}{\sqrt{1 - \frac{\Phi_{\text{eff}}}{g^2}}} \leq N_1 r, \quad (20)$$

где $N_1 = \left\lfloor \sqrt{1 - \frac{\varphi}{g^2}} / \sqrt{1 - \frac{\Phi_{\text{eff}}}{g^2}} \right\rfloor$ – целая часть положительного числа, не зависящего от b, g .

Полученные оценки (17), (20) удовлетворяют условию леммы, функция угла рассеяния молекул $\chi(b, g)$ является равномерно сходящейся по параметрам b, g и принимает значения из множества R . Неравенство (16) соответствует физическим процессам, когда приведенная кинетическая энергия взаимодействующих молекул превышает их приведенную потенциальную энергию.

Рассмотрим другой случай, когда у взаимодействующих молекул в газовой среде приведенная потенциальная энергия превышает приведенную кинетическую энергию относительного движения, т. е. имеет место неравенство

$$g^2 < \varphi_{\text{eff}} \quad \forall r \in [r_0, \infty). \quad (21)$$

Для анализа свойства равномерной сходимости по параметрам b , g при выполнении неравенства (21) функцию (1) запишем следующим образом:

$$\chi(b, g) = \pi + 2bi \int_{r_0}^{\infty} \frac{dr}{r^2 \sqrt{\frac{\Phi_{\text{eff}}}{g^2} - 1}}. \quad (22)$$

Теорема 2. Функция $\chi(b, g)$ равномерно непрерывна по параметрам b , g на множестве $D \times [r_0; \infty)$, где $D = [0; b^*] \times [0; g^*]$, и принимает значения комплексных чисел C при условии (21).

Доказательство. Так же, как в доказательстве теоремы 1, представим подынтегральную функцию в несобственном интеграле (22) в виде произведения двух функций – $f_1(r) = \frac{1}{r^2}$ и $f_3(b, g, r) = \frac{b}{\sqrt{\Phi_{\text{eff}}/g^2 - 1}}$. Заметим, что $f_3(b, g, r)$ является непрерывной при выполнении условия $b > r$, которое следует из неравенства (21). Несобственный интеграл $\int_{r_0}^{\infty} f_1(r) dr$ сходится. Покажем, что функция $f_3(b, g, r)$ является равномерно ограниченной по параметрам b , g на множестве $D \times [r_0; \infty)$, где $D = [0; b^*] \times [0; g^*]$. Имеем:

$$\lim_{\substack{b \rightarrow \infty \\ g \rightarrow \infty}} \frac{b}{\sqrt{\frac{\Phi_{\text{eff}}}{g^2} - 1}} = \lim_{\substack{b \rightarrow \infty \\ g \rightarrow \infty}} \frac{1}{\sqrt{\frac{\Phi}{(bg)^2} + \frac{1}{r^2} - \frac{1}{b^2}}} = r. \quad (23)$$

Из условия сходимости несобственного интеграла $\int_{r_0}^{\infty} f_1(r) dr$ и равномерной ограниченности функции $f_3(b, g, r)$ по лемме следует равномерная сходимость по параметрам функции $\chi(b, g)$, определенной выражением (22).

Рассмотрим физические процессы в газовых средах, когда выполнено условие (16) из теоремы 1, причем $g^2 > \Phi$ и $b < r \forall r \in [r_0, \infty)$. В этом случае подынтегральную функцию в несобственном интеграле (1) можно заменить приближением

$$\frac{1}{r^2 \sqrt{1 - \frac{\Phi_{\text{eff}}}{g^2}}} = \frac{1}{r^2 \sqrt{1 - \frac{\Phi + (gb/r)^2}{g^2}}} \approx \frac{1}{r^2 \sqrt{1 - \left(\frac{b}{r}\right)^2}}. \quad (24)$$

Тогда асимптотическое решение для функции угла рассеяния (1) примет вид

$$\chi(b, g) \approx \pi - 2b \int_{r_0}^{\infty} \frac{dr}{r^2 \sqrt{1 - \left(\frac{b}{r}\right)^2}} = \pi + 2 \arcsin \left(\frac{b}{r} \right) \Big|_{r_0}^{\infty} = \pi - \arcsin \left(\frac{b}{r_0} \right). \quad (25)$$

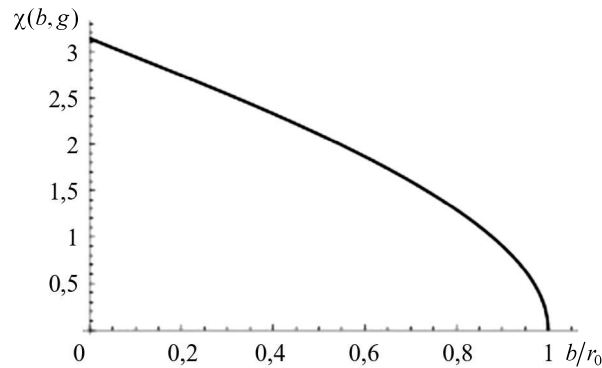
Как следует из решения (25), функция $\chi(b, g)$ в этом случае зависит от параметров b , r_0 . График решения приведен на рисунке, где за ось абсцисс принята величина b/r_0 .

Значения функции $\chi(b, g) \in [0; \pi)$, а траектории взаимодействующих молекул имеют невозвратный характер.

Рассмотрим другой предельный случай, в котором у взаимодействующих молекул приведенная потенциальная энергия превышает приведенную кинетическую энергию относительного движения

$g^2 < \varphi_{\text{eff}} = \varphi + (gb/r)^2$, причем $\varphi \ll g^2$. Эти условия выполняются, если $b > r \forall r \in [r_0, \infty)$. Подынтегральную функцию в несобственном интеграле (1) заменим приближением

$$\frac{1}{r^2 \sqrt{\frac{\varphi_{\text{eff}}}{g^2} - 1}} = \frac{1}{r^2 \sqrt{\frac{\varphi}{g^2} + \left(\frac{b}{r}\right)^2 - 1}} \approx \frac{1}{r^2 \sqrt{\left(\frac{b}{r}\right)^2 - 1}}.$$



Имеем:

$$\chi(b, g) \approx \pi + 2bi \int_{r_0}^{\infty} \frac{dr}{r^2 \sqrt{\left(\frac{b}{r}\right)^2 - 1}} = \pi - 2i \ln \left| \frac{b}{r} + \sqrt{\left(\frac{b}{r}\right)^2 - 1} \right|_{r_0}^{\infty}. \quad (26)$$

Допустим, что $b = \alpha r$, где константа $\alpha > 1$. Тогда решение (26) имеет вид

$$\chi(b, g) = \pi - 2i \ln \left| \frac{\alpha + \sqrt{\alpha^2 - 1}}{\frac{b}{r_0} + \sqrt{\left(\frac{b}{r_0}\right)^2 - 1}} \right|. \quad (27)$$

Как следует из асимптотического решения (27), значения функции угла рассеяния $\chi(b, g)$ находятся на множестве комплексных чисел C .

При $b = r_0$ решение функции угла рассеяния имеет логарифмическую точку разветвления. Для графической иллюстрации решения необходимо использовать риманову поверхность [12, 13]. Риманова поверхность получается соединением бесчисленного множества экземпляров физических листов D_k ($k = 1, 2, \dots, n-2$), в качестве которых используются плоскости с вырезанной положительной полуосью по следующему правилу: нижний берег разреза каждого листа D_k склеивается с верхним берегом разреза листа D_{k+1} . В начальной плоскости D_0 берется ветвь функции $\chi(b, g)$ и далее продолжается в области D_k ($k = 1, 2, \dots, n-1$).

Численные алгоритмы определения значений несобственных интегралов (1) изложены в работах [6, 7], где использованы квадратуры Ньютона – Котеса с адаптирующими узлами и квадратура Гаусса – Кристоффеля с оптимизацией погрешности. Полученные асимптотические решения (25), (26) можно применить для вычисления значений Ω -интегралов столкновения молекул, входящих в формулы коэффициентов переноса сред, а также для тестирования численных алгоритмов определения значений функции угла рассеяния молекул $\chi(b, g)$.

Современное математическое моделирование на основе макроуравнений тепломассопереноса невозможно без комплексного подхода к разработке алгоритмов, учитывающих все макро- и микро-особенности решаемой задачи. В работе использовался подход молекулярно-кинетической теории,

в котором расчетные значения коэффициентов переноса среды в уравнениях тепломассопереноса определяются на основе столкновительной части уравнения Больцмана. Однако здесь возникают сложности со структурой данной части: она является кратным несобственным интегралом с особенностями. Одна из них – обоснование свойств равномерной непрерывности функции угла рассеяния взаимодействующих молекул. В работе впервые был проведен анализ данных свойств, изложенный в теоремах 1 и 2. Для некоторых предельных случаев впервые были получены явные асимптотические решения для функции угла рассеяния молекул, дополняющие решения [3–5].

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и Кабинета министров Республики Татарстан в рамках научного проекта № 23-21-10008, <https://rscf.ru/project/23-21-10008/>.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Аксянов Р.А. и др. Рекомендации по повышению эффективности систем охлаждения радиоэлектронного оборудования // Изв. вузов. Авиационная техника. 2021. № 2. С. 107–112.
2. Липанов А.М., Карсканов С.А. Решение уравнений Бюргерса методом правых частей // Химическая физика и мезоскопия. 2022. № 2. С. 218–227.
3. Hirschfelder J.O., Curtiss C.F., Bird R.B. The Molecular Theory of Gases and Liquids. N.Y: John Wiley; London: Chapman & Hall, 1954. 1219 p.
4. Ferziger J.H., Kaper H.G. Mathematical Theory of Transport Processes in Gases. Amsterdam, London: North-Holland Publishing Company, 1972. 579 p.
5. Максвелл Дж.К. Труды по кинетической теории. М.: Бином, 2012. 406 с.
6. Анисимова И.В., Игнатьев В.Н. Вычислительные и компьютерные технологии определения коэффициентов переноса в моделях многокомпонентных смесей. Казань: Изд-во КНИТУ-КАИ, 2019. 256 с.
7. Анисимова И.В., Гиниятуллина Р.Р., Игнатьев В.Н. Об одном методе вычисления узлов и весов квадратур Гаусса – Кристоффеля // Математическое моделирование. 2013. № 3. С. 3–13.
8. Соколова И.А. Модели потенциалов межмолекулярного взаимодействия. Обзоры по теплофизическим свойствам веществ. М.: ТФЦ ИВТАН СССР, 1990. 137 с.
9. Bottin B. et al. Transport Properties of Collision-Dominated Dilute Perfect Gas Mixtures at Low Pressures and High Temperature // Progress in Aerospace Sciences. 2006. Vol. 42. Iss. 1. P. 38–83.
10. Фиктенгольц Г.М. Основы математического анализа. Ч. 2. СПб.: Лань, 2023. 464 с.
11. Соболев С.Л. Уравнения математической физики. М.: Наука, 1966. 443 с.
12. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: Физматиздат, 1963. 702 с.
13. Лаврентьев М.А., Шабат Б.В. Методы теории функции комплексного переменного. М.: Физматиздат, 1965. 716 с.

Поступила в редакцию 24.10.23

После доработки 8.11.23

Принята к публикации 8.11.23

Uniform Convergence of the Scattering Angle Function in Gas Mixtures

I.V. ANISIMOVA AND V.N. IGNAT'EV

Tupolev Kazan National Research Technical University, Kazan

The paper analyzes the uniform convergence in terms of the parameters of the scattering angle function of interacting molecules. This function is a key function from molecular kinetic theory and is used in computational technologies for determining the media transfer coefficients by the Chapman–Enskog method. The analysis will make it possible to reasonably determine the calculated values of transfer coefficients in gas mixtures in two-level numerical modeling of gas dynamics problems, which combine a description of macroprocesses based on macro-equations of heat and mass transfer with a micro description based on the Boltzmann equation.

Heat and mass transfer equations, transport characteristics of the medium, Boltzmann equation, improper multiple integrals, Gauss–Christoffel cubature formulas