

稀薄气体动力学

吴其芬 陈伟芳 黄琳 石于中 编

国防科技大学出版社

稀薄气体动力学

吴其芬 陈伟芳 黄琳 石于中 编

国防科技大学出版社

· 湖南长沙 ·

内容简介

本书着重从物理现象和工程应用角度出发,概要地介绍了稀薄气体动力学的基本概念、基本方程、基本方法和基本结论。该书既是稀薄气体动力学的入门书,又可作为力学及物理相关专业高年级学生或研究生教材,也可供有关研究人员查阅。

全书共分六章。第一章介绍了稀薄气体动力学的基本概念及基本假设;第二、三章推导出控制稀薄气体运动的基本方程;第四章简要介绍了自由分子流动的求解法及一些简要结果;第五章介绍了稀薄气体动力学基本方程近似求解法的基本思想;第六章简要介绍了稀薄气体流动问题的数值仿真方法的原理及相关程式化处理,并给出了几个简单流动的仿真实例。

图书在版编目(CIP)数据

稀薄气体动力学/吴其芬等编著. —长沙:国防科技大学出版社,2004.10
ISBN 7-81099-118-3

I. 稀... II. 吴... III. 稀薄气体动力学 IV. 0354

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2004)第 079287 号

国防科技大学出版社出版发行
电话:(0731)4572640 邮政编码:410073
E-mail:gfkdcbs@public.cs.hn.cn
责任编辑:耿 筠 责任校对:肖 滨
新华书店总店北京发行所经销
国防科技大学印刷厂印装

*

开本:787×960 1/16 印张:19 字数:352 千
2004 年 10 月第 1 版第 1 次印刷 印数:1—1000 册
ISBN 7-81099-118-3/O·18

定价:29.00 元

前 言

应用分子动力学方法，即统计力学方法讨论气体的宏观运动现象必然要引进几率函数概念，用以考察单个分子所处的运动状态。于是，几率分布函数满足的统计方程必定是通量守恒方程。速度分布函数方程为数通量守恒方程，能量分布函数方程为能量通量守恒方程。这构筑了分子动力学方法与经典气体动力学方法之间的必然联系，亦即能够从玻尔兹曼方程推导得到流体力学方程，或者说后者仅仅是前者在碰撞不变量下的特殊形式。因此稀薄气体动力学基本方程比流体力学方程包含有多得多的信息，分子动力论可能有助于对经典气体动力学现象所隐藏于分子相互作用之中内在机理的揭示。

稀薄气体动力学理论上的困难在于基本方程的求解和定解条件的嵌入两个方面。基本方程是一个具有七个自变量且包含有异常复杂的碰撞积分的非线性微分积分方程，使那些有意于精确求解基本方程的理论工作者为之驻足。基于解的基函数级数展开的矩方程方法得到了不同形式的矩方程，这是对经典气体动力学守恒方程的自然扩充，有助于更加精细地研究气体宏观运动规律。应用矩方法研究努森层内运动，对于小努森层流动下的间断面条件和壁面边界条件提法的正确性提供了理论指导。由于矩方法内在的局限性，时至今日它在其它流动范围的应用还欠缺。然而对于气体运动的两个极限状态，即连续介质流动和自由分子流流动的研究得到了长足的发展，在许多工程领域得到广泛的应用。流场内具有有限大小壁面的气体流动问题，壁面对于气体运动状态的扰动都是不可忽视的，往往是主导性的作用。除了极限状态外，有限壁面对于分布函数的扰动总是非平衡效应，因此，如果运动是非定常的话，提出初始条件相当于求解一个定常的稀薄气体动力学问题。由于这一类问题的解必定依赖于描述气体分子与壁面之间的相互作用几率函数的确定，即边界条件的嵌入，这是困难的。事实上，气体分子与壁面之间的相互作用，不仅依赖于构造壁面的材料以及壁面的运动学和动力学状态，还依赖于入射到壁面上分子的运动状态。而入射分子的运动状态在问题未得到求解之前是未知的，这意味着边界条件必须与动力学问题耦合求解给出。退而言之，即使入射分子的运动状态是已知的，正如前述，它与壁面相互作用也是呈现出色彩缤纷的景象，成为许多学者注重研究的课题。研究成果不仅直接为自由分子流动各宏观量的计算提供支撑，为数值仿真稀薄气体动力学问题提供边界计算依据，也在工程技术中得到

广泛应用。

由于工程技术以及理论研究的困难刺激了数值仿真的提出和发展,通过离散六维相空间及基本方程达到离散稀薄气体动力学问题的计算力学方法遇到了由于未知分布函数难以预测性以及离散空间维数的倍增带来对计算机要求苛刻,计算效率低下的困难。20世纪60年代开始,科学家基于对气体分子运动的本质性认识,提出追踪仿真分子轨迹,应用随机抽样技术和统计力学方法直接求解气体运动宏观量的方法获得巨大成功。通常将这一方法称作为直接仿真蒙特卡罗(DSMC)方法。它的成功在于应用有限数目的仿真分子代替大数目的真实分子,并对仿真分子间的碰撞及边界处理进行解耦计算,大大提高了计算效率,降低了对计算机的要求。这个方法实现了对物理过程的本质性描述,且具有高效率的特点,必然成为数值仿真稀薄气体动力学问题的主导性方法,得到了迅速发展。

本书正是基于以上的认识编辑而成的。全书共分六章,在介绍稀薄气体动力学基础知识的同时,注重它的工程应用。第一章在引进速度分布函数概念之后,介绍了稀薄气体动力学的基本假设和分子间碰撞动力学以及基态下各种通量的表达式;第二、三章推导得到稀薄气体动力学基本方程,对这一方程进行初步分析的基础上,介绍了由基本方程引导得出流体力学方程和磁流体力学方程,在介绍稀薄气体动力学问题数学提法时,注重叙述了气体分子与壁面相互作用及其工程化处理方法;第四章叙述了自由分子流动的一些实例,侧重介绍在航天技术中的应用;第五章注重介绍求解玻尔兹曼方程的矩方程方法及其在求解努森层内流动的应用;第六章简要介绍了DSMC方法的基本思想及基本技巧,注重介绍了碰撞计算和边界处理方法,给出了简单的仿真实例。

作者特别感谢教研室诸位老师的帮助,特别感谢出版社编辑部的诸位同志,正是由于他们认真而细致的审查与编辑,避免了许多错误和纰漏,也才能得以出版。由于作者学识浅陋,毕其心力也难以避免错误,敬请读者斧正。

作者

2004年6月

目 录

第一章 稀薄气体动力学基本概念

1.1 速度分布函数	(1)
1.1.1 速度分布函数的构造	(1)
1.1.2 由速度分布函数表示宏观量	(4)
1.2 稀薄气体动力学理论的基本假设	(8)
1.3 二元碰撞理论	(10)
1.3.1 分子相互作用模型	(10)
1.3.2 二元碰撞守恒律	(16)
1.3.3 碰撞参数的计算	(21)
1.4 初等动力学	(24)
1.4.1 微观特征量	(24)
1.4.2 状态方程	(28)
1.4.3 热力学关系式	(29)
1.4.4 输运系数	(29)
1.5 基态	(32)
1.5.1 各向同性平衡态分布函数及特征量	(32)
1.5.2 局部平衡态气体中通量计算	(38)

第二章 稀薄气体动力学基本方程

2.1 玻尔兹曼方程	(45)
2.1.1 按照拉格朗日观点推导玻尔兹曼方程	(45)
2.1.2 按照欧拉观点推导玻尔兹曼方程	(48)
2.1.3 玻尔兹曼方程适用性分析	(49)
2.1.4 混合气体的玻尔兹曼方程	(51)
2.2 玻尔兹曼方程的碰撞积分及流体力学方程组的导出 ..	(52)
2.2.1 碰撞积分表达式	(52)
2.2.2 碰撞积分的对称性及碰撞不变式	(54)
2.2.3 由玻尔兹曼方程导出流体力学方程组	(56)
2.3 玻尔兹曼方程的其它形式及其简化	(60)

2.3.1	玻尔兹曼方程的微分积分方程形式	(60)
2.3.2	玻尔兹曼方程的积分形式	(63)
2.3.3	线性化的玻尔兹曼方程	(64)
2.3.4	玻尔兹曼方程的模型方程	(67)
2.4	H 定理及麦克斯韦分布函数	(69)
2.4.1	H 定理的导出及其物理解释	(69)
2.4.2	玻尔兹曼方程的平衡态解	(72)
2.4.3	平衡态解与流体力学欧拉方程	(74)
2.4.4	平衡态流动解例	(78)
2.4.5	H 函数的物理意义和熵的微观解释	(80)
2.5	无量纲的玻尔兹曼方程及相似性准则	(83)
2.6	稀薄气体动力学问题的定解条件提法	(86)
2.6.1	初始条件和无限远处边界条件	(86)
2.6.2	物体表面边界条件	(87)
2.6.3	工程化的固壁边界条件	(89)
2.6.4	近似固壁边界条件的改进方案	(92)
2.7	流动特性的分区	(96)
第三章 磁流体力学方程		
3.1	电离气体	(99)
3.1.1	带电分子在均匀场中的回旋运动和漂移运动	(99)
3.1.2	带电分子在非均匀场中的运动特性	(103)
3.1.3	电离气体特征物理量	(109)
3.2	电离气体动力学问题	(114)
3.2.1	电离气体动力学方程组	(114)
3.2.2	电离气体动力学问题的定解条件	(120)
3.2.3	守恒方程及磁流体力学近似	(122)
3.3	平衡态的等离子体及磁流体力学箍	(128)
3.3.1	平衡态等离子体的德拜屏蔽	(128)
3.3.2	等离子体探测器	(131)
3.3.3	磁流体力学箍束	(138)
3.3.4	磁等离子体的介电特性	(146)
第四章 自由分子流动		
4.1	玻尔兹曼方程在自由分子流下的解	(149)

4.2 自由分子流动实例	(152)
4.2.1 向真空自由膨胀流动	(152)
4.2.2 活塞问题	(157)
4.2.3 瑞利问题	(159)
4.2.4 两平行平板间传热问题	(162)
4.2.5 夸特(Couette)流动	(165)
4.3 自由分子流动空气动力学	(171)
4.3.1 调节系数	(171)
4.3.2 空气动力学特性表达式	(174)
4.3.3 在物面上具有内自由度能量交换的情形	(176)
4.3.4 关于绝热壁平衡温度的讨论	(177)
4.3.5 典型实例空气动力学特性的计算	(179)
4.4 高空羽流的撞击效应	(181)
4.4.1 高空羽流流动图画及流动特性分区	(181)
4.4.2 高空羽流撞击效应的工程估算方法	(183)
第五章 玻尔兹曼方程的解	
5.1 求解玻尔兹曼方程方法概述	(187)
5.1.1 矩方程方法及其基本思想	(187)
5.1.2 按小参数展开方法	(190)
5.1.3 模型方程按小参数展开方法	(191)
5.1.4 多重尺度渐近展开方法	(195)
5.1.5 Enskog-Chapmann 方法	(199)
5.2 矩方程方法, 分布函数按 Hermite 多项式展开	(203)
5.2.1 Hermite 多项式及其性质	(203)
5.2.2 用矩表示展开式中的系数	(205)
5.2.3 展开式系数满足的矩方程	(206)
5.2.4 展开式的截断, 二十矩和十三矩方程	(209)
5.3 矩方程方法, 双峰分布函数解法	(216)
5.3.1 双峰分布函数解法要旨	(216)
5.3.2 Couette 流动	(217)
5.3.3 激波结构	(221)
5.4 努森层流动、速度滑移和温度跳跃	(228)
5.4.1 速度滑移和温度跳跃	(228)

5.4.2	努森层内物理量阶分析	(231)
5.4.3	速度滑移和温度跳跃方程及其定解条件	(234)
5.4.4	努森层速度剖面解及速度滑移	(237)
5.4.5	努森层温度剖面解及温度跳跃	(241)
5.4.6	工程应用的速度滑移和温度跳跃条件	(243)
5.5	过渡流动空气动力学系数工程计算方法概述	(244)
第六章 稀薄气体流动的 DSMC 方法求解		
6.1	DSMC 方法的一般性叙述	(248)
6.1.1	随机变量及随机抽样技术	(248)
6.1.2	Monte-Carlo 方法的基本思想及特点	(254)
6.1.3	求解玻尔兹曼方程的 Monte-Carlo 方法沿革	(257)
6.1.4	稀薄气体流动的 DSMC 方法仿真方案	(260)
6.2	DSMC 方法的程式化处理	(264)
6.2.1	流动计算区域的网格划分及宏观物理量数据存储	(264)
6.2.2	选取时间推进步长	(266)
6.2.3	选取仿真分子数及权因子	(267)
6.2.4	局域宏观量的计算	(270)
6.3	碰撞对的抽样及碰撞计算	(272)
6.3.1	非平衡气体分子碰撞数的表达式	(272)
6.3.2	仿真分子碰撞对抽样方法	(275)
6.3.3	碰撞截面表达式中未知参数的确定	(277)
6.3.4	碰撞计算	(278)
6.4	DSMC 方法中边界的处理方法	(280)
6.4.1	物面边界的处理方法	(280)
6.4.2	分子通过外边界及对称线(或面)的处理方法	(282)
6.5	DSMC 方法仿真实例	(286)
6.5.1	瑞利(Rayleigh)流动	(286)
6.5.2	夸特(Couette)流动	(288)
6.5.3	激波(Shock)结构	(288)
6.5.4	有限平板绕流	(292)
参考书目		(296)

第一章 稀薄气体动力学基本概念

1.1 速度分布函数

1.1.1 速度分布函数的构造

稀薄气体力学和经典气体动力学一样,是气体动力学的一个分支。它们都是将气体当做自身的研究介质,研究气体宏观运动及与其它介质相互间进行热化学与力学的作用规律。经典气体动力学是将气体当做一种连续的介质进行处理,是属于连续体力学的一个分支。连续体力学认为,物质介质是由质点连续充填其所占有的空间,并由此应用连续数学方法给出气体宏观运动的描述。事实上,当连续体力学应用于实际时,质点被解释成包含有可统计数目的分子在时间和空间两方面都是微观大、宏观小的物质微团。而赋予质点的宏观流体力学量,诸如密度、速度、温度以及作用力等,都是组成这一物质微团的所有分子运动状态的统计平均,并假定这些宏观量之间的依赖关系是由实验科学得到的质量守恒、动量守恒和能量守恒等规律支配的。因此,经典气体动力学的结论的正确性受到连续介质这一假设的限制,也即当且仅当度量介质运动的宏观空间尺度 L 以及时间尺度 T 远大于度量分子运动的微观尺度时,连续体力学的结论才是成立的。真实气体是由分子组成的,每个分子都在无休止地作不规则的热运动。通常采用气体分子的平均自由程 λ 作为度量分子运动的微观尺度。这个尺度 λ 随着气体密度 ρ 的减小而成比例地增大。换一句话说,气体密度越小,也即气体越稀薄,平均自由程 λ 越大。一旦 λ 与宏观尺度 L 的比值达到某个限制值以上时,经典气体动力学中将气体当做连续介质的前提不再成立,于是它的研究方法以及随之得到的结论都将失去效力。这时,必须应用稀薄动力学的研究方法。两种研究方法的本质区别在于,后者必须将气体当做是由大数目的分子组成的,并由此引申出应用统计力学的方法,给出气体宏观运动的描述。

正如前述,真实气体是由大数目分子组成的。每个分子都在无休止地作无规则热运动,分子间频繁地发生碰撞而相互交换着动量和能量。气体的宏观运

动状态就是组成这一气体的所有分子微观运动状态的总和。如果组成气体的所有分子的运动状态都是已知的话,那么在观念上也就认为气体的宏观运动状态是已知的。依据牛顿力学原理,只要事先确知所有气体分子的初始运动状态以及所受到的作用力,就可以通过求解控制气体分子运动的方程组得到任一时刻气体分子的运动状态。气体分子运动的这种精确描述方法,虽然在理论上来说是可行的,但是在实际操作中,存在三个方面的困难。其一,难以确定气体分子在初始时刻的运动状态,亦即初始时刻位置、速度等物理量的大小;其二,通常组成气体的分子数目非常巨大,而气体分子间频繁的碰撞作用,又使得控制气体分子运动的微分方程是强耦合的,因此应用计算机数值求解控制气体分子运动的微分方程组事实上几乎是不可能的;其三,即使是确定了每一个气体分子在任意时刻位置、速度等物理量的大小,但对整个气体分子的运动状态仍缺乏一个清晰的认识,必须应用统计平均的方法给出宏观运动状态的描述。直到 20 世纪 60 年代,稀薄气体力学工作者通过引进仿真分子的概念,建立了直接跟踪仿真分子的运动轨迹进行统计平均求出宏观流体力学量的直接仿真蒙特卡罗(DSMC)方法之后,才在数值求解上解决了这些困难。从而推动了稀薄气体动力学发展及其应用。但是,在理论求证方面,由于这些困难的存在,通过跟踪并求出每一个气体分子运动的方法研究气体的运动规律是不现实的。

注意到以宏观尺度考察气体的宏观运动时,气体总是由巨大数目的分子组成。一方面,组成气体的每个分子的瞬时速度方向及其大小是不同的;另一方面,对于指定的分子,由于与其它分子不断碰撞而改变自己的速度方向及其大小,使得人们有可能引进特征几率函数对气体分子所处运动状态的几率进行统计描述。这样的描述方法比起跟踪所有气体分子轨迹的精细描述既来得简单,又来得明了。这种描述方法称分子动力论方法,是稀薄气体动力学基本的理论方法。

气体分子组成的系统状态是由组成分子的运动状态,即分子所在的物理空间位置以及它所具有的速度所决定的。因此用以描述系统状态最直接的特征几率函数必定是确定在特定的物理空间和速度空间中可能出现的分子数目的几率函数。这里,首先通过由同类分子组成的称为简单气体的运动状态的描述,说明这一特征几率函数的构造法。假定在某一空间域中填充有同类的 N 个分子组成的气体,那么在由分子运动状态的三个物理空间坐标 $\mathbf{x}=(x_1, x_2, x_3)$ 和三个速度空间坐标 $\boldsymbol{\xi}=(\xi_1, \xi_2, \xi_3)$ 构成的 6 维相空间 γ 中, N 个分子则由具有坐标 $(\mathbf{x}_i, \boldsymbol{\xi}_i)$ ($i=1, 2, \dots, N$) 的 N 个点所描述,并由此确定了气体的运动状态。更方便的作法是定义 $6N$ 维相空间 Γ , 使其坐标是所有 N 个分子的物理空间位置坐标和速度分量坐标。在这个相空间中,整个 N 个分子系统由单一的点所表示。

于是 N 个分子系统处于某一特定状态下的几率 P_N^r 显然是与这一空间的体积元 $dr_N dv_N$ 成正比例, 即有

$$\begin{aligned} P_N^r(t, r_N, v_N) &= F_N(t, r_N, v_N) dr_N dv_N \\ &= F_N(t, z_1, z_2, \dots, z_N) dz_1 dz_2 \dots dz_N \\ &= F_N(t, x_1, \dots, x_N; \xi_1, \dots, \xi_N) dx_1 \dots dx_N d\xi_1 \dots d\xi_N \quad (1.1) \end{aligned}$$

式中

$$\begin{aligned} dx &= dx_1 dx_2 dx_3 \\ d\xi &= d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 \\ dz &= dx d\xi \\ r_N &= (x_1, x_2, \dots, x_N) \\ v_N &= (\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) \\ z_N &= (x_N, \xi_N) \end{aligned}$$

而 P_N^r 是在 Γ 空间中对应于特定状态点 (r_N, v_N) 邻域 $dr_N dv_N$ 内系统的几率, 且称函数 F_N 为几率密度函数。

如果系统中所有的分子是恒等的, 那么在 6 维相空间 γ 中, 当分子作位置互换(置换)时系统状态是不变的。然而在 γ 空间中每一个置换对应于 Γ 空间中新的点, 因此, 在 γ 空间中 N 个恒等分子的一个状态是与 Γ 空间中 $N!$ 个点相对应。这 $N!$ 个点的分布决定了 $F_N(t, z_1, \dots, z_n)$ 是关于变量 z_i 的对称函数。于是, 如果

$$p_N^r(t, r_N, v_N) = f_N(t, x_1, \dots, x_N, \xi_1, \dots, \xi_N) dx_1 \dots dx_N d\xi_1 \dots d\xi_N \quad (1.2)$$

是在 γ 空间中 N 个分子系统在点 (x_i, ξ_i) 邻域 $dx_i d\xi_i$ 内几率的话, 那么对于恒等分子显然有

$$f_N dx_1 \dots dx_N d\xi_1 \dots d\xi_N = N! F_N dx_1 \dots dx_N d\xi_1 \dots d\xi_N \quad (1.3)$$

通常还引进函数

$$\begin{aligned} F_s(t, z_1, \dots, z_s) &= F_s(t, x_1, \dots, x_s; \xi_1, \dots, \xi_s) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} F_N(t, z_1, \dots, z_N) dz_1 \dots dz_N \quad (1.4) \end{aligned}$$

确定联合观察 S 个分子处于状态 $(z_1, \dots, z_s)$, 而余下的 $N-S$ 个分子状态相独立的几率。相应地有

$$f_s(t, z_1, \dots, z_s) = \frac{N!}{(N-S)!} F_s(t, z_1, \dots, z_s) \quad (1.5)$$

而且所有的函数 $F_s \geq 0 (s=1, 2, \dots, N)$ 且为归一化的, 即

$$\int_{-\infty}^{+\infty} F_s dz_1 dz_2 \dots dz_s = 1 \quad s = 1, 2, \dots, N \quad (1.6)$$

在稀薄气体动力学中, 仅仅对于一个分子的几率函数 $F_1(t, x, \xi)$ 感兴趣。

这一函数确定了 t 时刻在点 (x, ξ) 邻域微元 $dx d\xi$ 上所求单一分子的几率。由式(1.5)知,有

$$f(t, x, \xi) = NF_1(t, x, \xi) \quad (1.7)$$

特别地,称 $f(t, x, \xi)$ 为速度分布函数,且通常简称为分布函数。系统中所有的分子是恒等的,因此它们的分布函数 $f(t, x, \xi)$ 也是恒等的。于是, $f(t, x, \xi) dx d\xi$ 确定了 t 时刻在点 $x = (x_1, x_2, x_3)$ 附近物理空间体积元 dx , 点 $\xi = (\xi_1, \xi_2, \xi_3)$ 附近速度空间体积元 $d\xi$ 内速度为 ξ 的可能的分子数目。至此,我们构造得到了稀薄气体动力学中最重要的、最广泛应用的特征几率函数 $f(t, x, \xi)$, 由此几率函数可导出描述分子运动其它特征的几率函数。速度分布函数 $f(t, x, \xi)$ 成为稀薄气体动力学的理论基础。稀薄气体动力学就在于确定出速度分布函数 $f(t, x, \xi)$ 所满足的方程,并在不同条件下求解得到,从而确定出气体运动的宏观规律。

在稀薄气体动力学理论中,通常将单原子分子、多原子分子、电子以及离子等所有组成气体的物质粒子统一称之为分子。而根据分子物理或化学特性的不同,将其区分成不同的类。大多数气体并不是由单一分子类组成的简单气体,而是由两个或多个分子类的大量分子所组成的,通常称这样的气体为混合气体。仿照以上对于简单气体的作法,对于混合气体中特定的类 $s=1, 2, \dots, p$, 可以构造一个分布函数 $f_s(t, x, \xi)$, 用以描述这一类分子组成的气体组元的运动状态。于是,对于由 p 个类分子组成的混合气体包含有 p 个气体组元,可构造 p 个组元的分布函数 f_s 。整个气体运动状态,则由这 p 个分布函数得以描述。

1.1.2 由速度分布函数表示宏观量

在工程实际中,人们并不是对气体分子运动的微观特征及其物理量感兴趣,也不是对速度分布函数感兴趣,只是通过求解速度分布函数,达到求得能够直接感知并测量的描述气体宏观运动的宏观量,进而指导工程实践。因此倘若能给出由速度分布函数表示宏观量的表达式,那么稀薄气体力学理论的任务就归结为构造速度分布函数满足的方程,并求解方程给出特定运动的速度分布函数。

事实上,由于速度分布函数 $f(t, x, \xi)$ 确定了 t 时刻可能出现在点 (x, ξ) 邻域上体积为 $dx d\xi$ 的空间内的分子数目,且所有的宏观物理量都是分子运动特征量的统计平均,所以宏观量必然由分布函数及分子运动特征量表达出。由 1.1.1 节所给出的速度分布函数 $f(t, x, \xi)$ 的定义及其所表达的物理意义,立即得到在时刻 t , 位置 x 上运动速度处于 ξ 和 $\xi + d\xi$ 之间的分子数目为

$$dn = f(t, x, \xi) d\xi = f(t, x, \xi) d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 \quad (1.8)$$

将上式在全速度区域上积分,即得单位体积内分子的总数目,称为分子数密度

n , 即为

$$n(t, x) = \int f(x, \xi) d\xi = \int_{-\infty}^{\infty} f(t, x, \xi) d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 \quad (1.9)$$

显然, 若上式右方积分有意义, 必须有

$$f(t, x, \xi) \rightarrow 0, \text{ 当 } |\xi| \rightarrow \pm \infty \text{ 时} \quad (1.10)$$

这是速度分布函数的一个重要性质。知道了气体分子数密度 n 以及分子质量 m 之后, 那么气体的密度 ρ 则由它们的乘积给出, 即有

$$\rho = mn \quad (1.11)$$

热力学温度 T 表征分子热运动的激烈程度, 由热运动的平均能量确定, 定义为 $\frac{3}{2}nkT$ = 单位体积内总的热运动能量。这里 k 为玻尔兹曼常数, 因子 $\frac{3}{2}$ 是表示每一个自由度具有的平均能量为 $\frac{1}{2}kT$, 这与单原子分子平动自由度为 3 相联系。由于这一原因, 通常还称按照这种定义得到的温度为平动动能温度。每个分子热运动平动动能是 $\frac{1}{2}mc^2$, 这里 $c^2 = |\mathbf{c}|^2$, $\mathbf{c} = (c_1, c_2, c_3)$ 为分子的热运动速度。具有速度为 ξ 和 $d\xi$ 之间的分子数为 $dn = f d\xi$, 于是与这些分子相联系的热运动能量为 $\frac{1}{2}mc^2 f d\xi$, 其积分即得单位体积内总的热运动能量, 亦即温度 T 可由下式定义式求得

$$\frac{3}{2}nkT = \int \frac{1}{2}mc^2 f(t, x, \xi) d\xi \quad (1.12)$$

由式(1.9)及几率理论知识知, 描述分子某一特性在单位体积内的宏观集体表现的物理量即是这一特性的平均值。正如在求热运动能量平均值时所看到的那样, 分子特性的平均值 $\bar{\phi}$ 可由这一特性 $\phi(\xi)$ 为权函数在分布函数上积分得到, 即表示成

$$n\bar{\phi} = \int \phi(\xi) f(t, x, \xi) d\xi \quad (1.13)$$

在工程实际中, 需要的宏观量除了分子特性的平均值外, 更大一类的宏观量是分子特性的平均通量。对于给定的分子特性 ϕ , 那么 ϕ 穿过与实验室坐标固联的物理空间表面元 ds 的通量将是 $\phi \xi ds$, 在分布函数上积分即得这一分子特性的平均通量 I 为

$$I = \int \phi \xi f(t, x, \xi) d\xi ds = n \bar{\phi \xi} ds \quad (1.14)$$

由上式得通过单位面积的平均通量向量 $\bar{I}$ 为

$$\bar{I} = \int \phi \xi f(t, x, \xi) d\xi = n \bar{\phi \xi} \quad (1.15)$$

在式(1.15)中,令 $\phi=1$, 得分子数量 N , 即

$$N = \int \xi f(t, x, \xi) d\xi = n \bar{\xi} \quad (1.16)$$

气体的宏观运动速度 $u=(u, v, w)$ 定义为分子数通量向量与数密度 n 之比, 则有

$$u(t, x) = \frac{1}{n} \int \xi f(t, x, \xi) d\xi = \bar{\xi} \quad (1.17)$$

这一定义与应用式(1.13)由平均值定义的宏观运动速度相一致。令 $\phi=m$, 得质量通量向量 $\dot{m}$, 即

$$\dot{m}(t, x) = \int m \xi f(t, x, \xi) d\xi = n m \bar{\xi} = \rho u \quad (1.18)$$

上式表明, 还可以应用质量通量向量定义宏观运动速度。这样, 单独分子的热运动速度 c 可定义为相对于宏观运动的速度, 即

$$c(t, x) = \xi(t, x) - u(t, x) \quad (1.19)$$

显然, 混合气体运动的宏观量则根据所需表示的宏观量特性取所有组元气体对应宏观量求和或进行加权平均给出。例如

$$n = \sum_i n_i = \sum_i \int f_i(t, x, \xi) d\xi \quad (1.20)$$

$$\rho = \sum_i \rho_i = \sum_i m_i n_i \quad (1.21)$$

$$u = \frac{\dot{m}}{\rho} = \frac{\sum_i \rho_i u_i}{\sum_i \rho_i} \quad (1.22)$$

以上各式中, 下标 s 表示组成混合气体的第 s 类成分, 和号 Σ 下的 s 表示对所有类求和。

一般来说, 在混合气体情形中总存在两种平均量或平均通量, 即类的和整个气体的平均量或平均通量。特别地, 对于混合气体的每一类组元气体都存在有类的平均速度 u_i 和气体的平均速度 u 。于是任一单独分子都可定义两个热运动速度, 这就是相对于气体平均速度的随机速度 c_i , 即

$$c_i = \xi_i - u \quad (1.23)$$

和相对于所在类组元气体平均速度的随机速度 c_i' , 即

$$c_i' = \xi_i - u_i \quad (1.24)$$

由式(1.17)得 $\overline{c_i'} = 0$, 但 $\bar{c}_i$ 不一定为 0, 它是类平均速度 u_i 和气体平均速度 u 的差, 称为此类组元气体的扩散速度 V_i , 即

$$V_i = u_i - u = \bar{c}_i = \frac{1}{n_i} \int c f_i(t, x, \xi) d\xi \quad (1.25)$$

应用式(1.18)可得 $\dot{m} = \sum_s \rho_s u_s = \sum_s \rho_s V_s + u \sum_s \rho_s = \sum_s \rho_s V_s + \dot{m}$, 由此得到所有组元的质量扩散之和为 0, 表示成

$$\sum_s \rho_s V_s = 0 \quad (1.26)$$

应用式(1.15)、(1.23)及(1.25), 令 $Q_s = m_s \xi$ 可得类 s 的动量通量 $\dot{M}_s$, 即

$$\dot{M}_s = \rho_s (u u + V_s u + u V_s) + \rho_s \overline{c c_s} \quad (1.27)$$

式中各项分别表示总的动量通量、动量通量扩散通量、扩散动量通量和热运动动量通量。热运动动量通量正是通常所说的类 s 的应力张量 P_s , 即

$$P_s = \rho_s \begin{bmatrix} \overline{c_1 c_{1s}} & \overline{c_1 c_{2s}} & \overline{c_1 c_{3s}} \\ \overline{c_2 c_{1s}} & \overline{c_2 c_{2s}} & \overline{c_2 c_{3s}} \\ \overline{c_3 c_{1s}} & \overline{c_3 c_{2s}} & \overline{c_3 c_{3s}} \end{bmatrix}$$

或

$$(p_{ij})_s = \rho_s \overline{c_i c_{js}} = \rho_s \int c_i c_j f(t, x, \xi) d\xi \quad (1.28)$$

显然, $\overline{c_i c_{js}} = \overline{c_j c_{is}}$, 因此应力张量是对称张量。张量对角线元素之和为张量的迹, 是一个不变量。它表示 s 组元气体的分压力 p_s , 即

$$p_s = \frac{1}{3} \rho_s \sum_i \overline{c_i c_{is}} = \frac{1}{3} \rho_s \overline{c^2_s} = n_s k T_s \quad (1.29)$$

上式表明每一组元气体都是完全气体。对以上结果求和即得整个气体对应的宏观量。总的动量通量张量

$$\dot{M} = \rho u u + \sum_s P_s = \rho u u + P \quad (1.30)$$

第一项是总的动量通量, 第二项是气体的应力张量 $P = \sum_s P_s$ 。混合气体的静压力 $p = \sum_s p_s = \sum_s n_s k T_s$ 。如果每一类组元的温度都为 T , 则有

$$p = n k T \quad (1.31)$$

在式(1.15)中, 令 $\phi = \phi_s = \epsilon_s + \frac{1}{2} m_s \xi_s^2$ 。这里 ϵ_s 是分子的内能, 包括振动的、旋转的、电磁的和化学的能量总和, 并应用式(1.23)得能量通量向量 E_s 为

$$E_s = u \left(\frac{1}{2} \rho_s u^2 + n_s \bar{\epsilon}_s + \frac{1}{2} \rho_s \overline{c^2_s} \right) + \frac{1}{2} \rho_s u^2 V_s + \rho_s u (u \cdot V_s) + u \cdot P_s + \int c (\epsilon_s + \frac{1}{2} m_s c^2) f_s(t, x, \xi) d\xi \quad (1.32)$$

上式最后一项是由分子随机运动引起的能量通量, 即热流矢量 q_s ,

$$q_s = \int c (\epsilon_s + \frac{1}{2} m_s c^2) f_s(t, x, \xi) d\xi \quad (1.33)$$

由 $P_i = \tau_i + p_i I$, 这里 τ_i 是类 s 的切应力张量, I 是单位张量, 得 $u \cdot P_i = u \cdot \tau_i + p_i u$ 。又由 $\frac{1}{2} m_i \bar{c}_i^2 = \frac{3}{2} k T_i$, 于是对式 (1.32) 两方在类上求和, 整理可得气体总能量通量向量 $\dot{E}$ 的表达式为

$$\dot{E} = \rho u \left(\frac{1}{2} u^2 + h \right) + q + u \cdot \tau \quad (1.34)$$

式中 $h = \frac{1}{\rho} \sum_i \rho_i h_i$ 为混合气体单位质量的焓, $h_i = \frac{1}{m_i} \left(\bar{e}_i + \frac{3}{2} k T_i \right) + \frac{p_i}{\rho_i}$ 是类 s 组元气体单位质量的焓; $\tau = \sum_i \tau_i$ 是混合气体的切应力张量; $q = \sum_i q_i$ 是混合气体的热流矢量。通常还称 $H = \frac{1}{2} u^2 + h$ 为单位质量混合气体的总焓。于是, 由式 (1.34) 表示的能量通量是由混合气体的总焓对流、随机运动引起的能量通量和气体功所组成。

如果组成混合气体的分子类中存在带电分子类的话, 那么类 s 的电荷通量就是相对于实验室坐标系的电流 J_i 。在式 (1.15) 中, 令 $\phi = \phi_i = e Z_i$, 得出

$$J_i = n_i e Z_i u_i = n_i e Z_i V_i + n_i e Z_i u \quad (1.35)$$

式中 e 是单位电荷, Z_i 是类 s 的分子所带的电荷数。将式 (1.35) 对所有的带电类分子求和, 即得总的电流 J

$$J = \sum_i J_i = \sum_i n_i e Z_i V_i + u \sum_i n_i e Z_i = j + u \rho_e \quad (1.36)$$

右方第一项 j 是传导电流, 第二项是对流电流。如果气体是电中性的, 则

$$\rho_e = \sum_i n_i e Z_i = 0$$

即对流电流为 0。这时, 气体内总的电流等于传导电流, 即

$$J = j = \sum_i e Z_i \int c f_i(t, x, \xi) d\xi$$

以上分析表明, 如果能得到气体特定运动条件的速度分布函数 $f(t, x, \xi)$ 或等价于一个分子的几率函数 $F(t, x, \xi) \equiv F_1(t, x, \xi)$, 那么这一气体运动状态不仅在微观上, 同时也在宏观上得到确定的描述。

1.2 稀薄气体动力学理论的基本假设

任何科学理论总是需要依赖某些假设作为构造自己体系的出发点, 稀薄气体力学自然也不例外。除了一些可以想象得到的假设之外, 属于稀薄气体动力学理论所特有的基本假设有三个, 依次叙述之。