

01;02;03

## Задача Смолуховского в полиатомных газах

© А.В. Латышев, А.А. Юшканов

Московский педагогический университет

Поступило в Редакцию 10 марта 1998 г.

Построено модельное кинетическое уравнение, описывающее поведение молекулярных (полиатомных) газов, в которых колебательные степени свободы "заморожены", а вращательные рассматриваются квазиклассически. Получено аналитическое решение задачи Смолуховского о скачке температуры и слабом испарении над плоской поверхностью в полупространстве. Проведены численные расчеты.

Задача Смолуховского привлекает к себе неизменное внимание в течение длительного времени. Это связано с теоретической значимостью проблемы и с многочисленными практическими приложениями. Для простого газа эта задача рассматривалась с использованием как аналитических методов [1], так и приближенных и численных методов для полного уравнения Больцмана [2,3].

Указанные работы имели дело со случаем одноатомного газа. В то же время большинство газов относятся к разряду многоатомных (молекулярных). Поэтому изучение указанных процессов для случая молекулярных газов представляет несомненный интерес. Известно, что кинетические процессы в молекулярных газах отличаются большей сложностью по сравнению со случаем одноатомного (простого) газа [4]. Данное обстоятельство приводит к повышению роли модельных интегралов столкновений. Важным обстоятельством является то, что для многих молекулярных газов существует широкий диапазон температур (от десятков до тысяч градусов Кельвина), в котором, с одной стороны, колебательные степени свободы "заморожены", т.е. не вносят вклад в термодинамические и кинетические свойства газа, а с другой стороны, вращательные степени свободы можно рассматривать квазиклассически [5]. Именно такой случай здесь и рассматривается.

Модельные интегралы столкновений для такого случая рассматривались в работах [6–8]. В работе [9] был рассмотрен модельный интеграл

столкновений для двухатомного газа и решена задача о скачке температуры. В данной работе рассматривается обобщение предложенного в [9] подхода на случай полиатомных газов, т. е. газов, молекулы которых состоят из трех и более атомов.

Модельное кинетическое уравнение в форме БГК (Бхатнагар, Гросс, Крук) для стационарного случая имеет, как известно, следующий вид

$$\mathbf{v}\nabla f = \nu(f_{eq} - f). \quad (1)$$

Здесь  $\mathbf{v}$  — скорость молекул,  $f(\mathbf{r}, \mathbf{v})$  — функция распределения,  $\nu$  — частота столкновений молекул. Функция  $f_{eq}$  — равновесная функция распределения с усредненными характеристиками:

$$f_{eq} = n_{eq} \left( \frac{m}{2\pi k T_{eq}} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left[ -\frac{m}{2k T_{eq}} (\mathbf{v} - \mathbf{u}_{eq})^2 \right],$$

где  $m$  — масса молекулы,  $k$  — постоянная Больцмана.

Величины  $n_{eq}$ ,  $T_{eq}$ ,  $\mathbf{u}_{eq}$  вычисляются как моменты функции распределения  $f$ .

В случае, когда внутренние степени свободы квазиклассические, модельные кинетические уравнения для полиатомных газов можно записать в виде (1) с равновесной функцией распределения

$$f_{eq}^p = n_* \frac{(m^3 J_1 J_2 J_3)^{\frac{1}{2}}}{(2\pi k T_*)^3} \exp \left[ -\frac{m}{2k T_*} (\mathbf{v} - \mathbf{u}_*)^2 - \frac{J_1 \omega_1^2 + J_2 \omega_2^2 + J_3 \omega_3^2}{2k T_*} \right].$$

Здесь  $J_1$ ,  $J_2$ ,  $J_3$  — главные моменты инерции молекулы,  $\omega = (\omega_1, \omega_2, \omega_3)$  — вектор угловой скорости ее вращения. Величины  $n_*$ ,  $\mathbf{u}_*$ ,  $T_*$  определяются как соответствующие моменты функции распределения  $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, \omega)$ :

$$n_* = \int f d^3 v d^3 \omega, \quad \mathbf{u}_* = \frac{1}{n_*} \int \mathbf{v} f d^3 v d^3 \omega,$$

$$T_* = \frac{1}{3kn_*} \int \left[ \frac{m}{2} (\mathbf{v} - \mathbf{u}_*)^2 + \frac{1}{2} (J_1 \omega_1^2 + J_2 \omega_2^2 + J_3 \omega_3^2) \right] f d^3 v d^3 \omega.$$

В дальнейшем нас будет интересовать случай, когда градиенты термодинамических величин малы. Малой будем полагать также скорость газа в системе отсчета, связанной с поверхностью раздела. При этом

функция распределения может быть представлена в линеаризованном виде  $f = f_0(1 + \varphi)$ . Здесь

$$f_0 = n_s \frac{(m^3 J_1 J_2 J_3)^{1/2}}{(2\pi k T_s)^3} \exp \left[ -\frac{mv^2}{2kT_s} - \frac{J_1 \omega_1^2 + J_2 \omega_2^2 + J_3 \omega_3^2}{2kT_s} \right],$$

$T_s$  — температура поверхности,  $n_s$  — насыщенного пара материала поверхности при температуре поверхности,  $|\varphi| \ll 1$ .

Линеаризация модельного интеграла столкновений в (1) в этом случае приводит к следующему кинетическому уравнению

$$(\mathbf{v} \nabla \varphi) + \nu \varphi = \left[ \frac{\delta n}{n_s} \left( \frac{mv^2}{2kT_s} - \frac{J_1 \omega_1^2 + J_2 \omega_2^2 + J_3 \omega_3^2}{2kT_s} \right) + \frac{m}{kT_s} \mathbf{u}_* \cdot \mathbf{v} \right]. \quad (2)$$

Здесь

$$\delta n = n_* - n_0 = \int f_0 \varphi d^3 v d^3 \omega, \quad \mathbf{u}_* = \frac{1}{n} \int f_0 \varphi \mathbf{v} d^3 v d^3 \omega, \quad \delta T = T_* - T_s,$$

$$\frac{\delta T}{T_s} = -\frac{\delta n}{n_s} + \frac{2}{3knT_s} \int f_0 \varphi \left[ \frac{mv^2}{2} + \frac{1}{2}(J_1 \omega_1^2 + J_2 \omega_2^2 + J_3 \omega_3^2) \right] d^3 v d^3 \omega.$$

Введем декартову систему координат с центром на поверхности раздела газ–конденсированная фаза и осью  $x$ , направленной перпендикулярно поверхности в сторону газа. Пусть вдали от поверхности в газе существует градиент температуры, перпендикулярный поверхности. На поверхности могут происходить процессы испарения и конденсации, в результате которых может существовать среднemasовая скорость газа в направлении от или к поверхности. Тогда  $T = T_e + Ax$  при  $x \rightarrow \infty$ . Здесь  $A = \left( \frac{dT}{dx} \right)_{x=\infty}$ ; величина  $\Delta T = T_e - T_s$  называется скачком температуры. Обозначим скорость газа вдали от поверхности через  $U$ .

Кинетическое уравнение (2) можно записать в безразмерных переменных в следующем виде:

$$\xi_x \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \varphi(x, \xi, \omega) = \frac{4}{\pi^2} \int e^{-\xi'^2 - \omega'^2} k(\xi, \omega; \xi', \omega') \varphi(x, \xi', \omega') \omega'^2 d^3 \xi' d^3 \omega'. \quad (3)$$

Здесь

$$k(\xi, \omega; \xi', \omega') = 1 + 2\xi\xi' + \frac{1}{3}(\xi^2 + \nu^2 - 3)(\xi'^2 + \nu'^2 - 3)$$

— ядро уравнения.

Будем считать, что молекулы отражаются от стенки чисто диффузно, т. е.  $f(0, \xi, \omega) = f_0$ , если  $\xi_x > 0$ . Для функции  $\varphi$  отсюда имеем

$$\varphi(0, \xi, \omega) = 0, \quad \text{если } \xi_x > 0. \quad (4)$$

Вдали от стенки функция распределения должна переходить в чепмен-энскоговскую, т. е.

$$\varphi(0, \xi, \omega) = \varphi_{as}(x, \xi, \omega) + o(1), \quad \text{если } x \rightarrow \infty, \quad \xi_x < 0, \quad (5)$$

где

$$\varphi_{as} = \varepsilon_n + 2U\xi_x + \varepsilon_t(\xi^2 + \omega^2 - 3) + K(x - \xi_x)(\xi^2 + \omega^2 - 4), \quad K = A/T_s.$$

Разложим функцию  $\varphi$  по двум ортогональным направлениям  $e_1 = 1$  и  $e_2 = \xi^2 + \omega^2 - 3$ :

$$\varphi = h_1(x, \xi_x) + \gamma(\xi^2 + \omega^2 - 3)h_2(x, \xi_x), \quad \gamma^2 = \frac{1}{3}. \quad (6)$$

Введем вектор-столбец  $h = [h_1 \ h_2]^t$ . Тогда на основании (3) получим систему уравнений, которую можно представить в векторном виде (полагая  $\mu = \xi_x$ ):

$$\mu \frac{\partial h}{\partial x} + h(x, \mu) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\mu'^2} K_0(\mu, \mu') h(x, \mu') d\mu'. \quad (7)$$

Здесь матрица-функция  $K_0(\mu, \mu') = K(\mu') + 2\mu\mu' L(\mu')$  — ядро уравнения (8),

$$K(\mu) = \begin{vmatrix} 1 & \kappa(\mu) \\ \kappa(\mu) & \kappa^2(\mu) + 5/6 \end{vmatrix}, \quad L(\mu) = \begin{vmatrix} 1 & \kappa(\mu) \\ 0 & 0 \end{vmatrix},$$

$$\kappa(\mu) = \gamma \left( \mu^2 - \frac{1}{2} \right).$$

Граничные условия (4) и (5) с помощью разложения (6) преобразуются в следующие:

$$h(0, \mu) = \begin{vmatrix} 0 \\ 0 \end{vmatrix}, \quad \mu > 0, \quad (8)$$

$$h(x, \mu) = h_{as}(x, \mu) + o(1), \quad x \rightarrow \infty, \quad \mu < 0, \quad (9)$$

где

$$h_{as}(x, \mu) = \left\| \begin{array}{l} \varepsilon_n + 2U\mu - K(x - \mu) \\ \frac{1}{\gamma}(\varepsilon_t + K(x - \mu)) \end{array} \right\|.$$

Опуская решение задачи (7)–(9), известное по работам [1,9], приведем формулы для вычисления скачка температуры и скачка концентрации в размерном виде

$$\varepsilon_t = \delta_T IK + \gamma_U 2U, \quad \varepsilon_N = \delta_N + \gamma_N 2U,$$

где  $\delta_t$ ,  $\delta_N$  суть коэффициенты скачков температуры и концентрации, а  $U$  — размерная скорость испарения.

Численные расчеты показывают, что  $\delta_T = 1.87224$ . Отметим, что для двухатомного газа эта величина равна 2.05647 [9], а для простого газа — 2.2049 [1]. Таким образом, скачок температуры монотонно убывает по мере роста числа атомов в молекуле (при условии, что число Прандтля постоянно).

Предложенный метод аналитического решения может быть применен к широкому классу граничных задач для полиатомных газов.

Работа выполнена по гранту РФФИ (код проекта 97–01–00333).

## Список литературы

- [1] Латышев А.В. // ПММ. 1990. Т. 54. В. 4. С. 581–586.
- [2] Gross E.P., Jackson E.A., Ziering S. // Phys. Fluids. 1959. V. 2. P. 432–441.
- [3] Onishi Y., Sone Y. // J. Phys. Soc. Japan. 1978. V. 44. № 6. P. 1981–1994.
- [4] Жданов В.М., Алиевский М.Я. Процессы переноса и релаксации в молекулярных газах. М.: Наука, 1989. 336 с.
- [5] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. М.: Наука, 1964. 567 с.
- [6] Рыков В.А. // Изв. АН СССР. Сер. МЖГ. 1975. № 6. С. 105–115.
- [7] Ларина И.Н., Рыков В.А. // Численные методы в динамике разреженных газов. В. 4. М.: ВЦ АН СССР, 1978. С. 52–68.
- [8] Ларина И.Н., Рыков В.А. // Изв. АН СССР. Сер. МЖГ. 1986. № 5. С. 141–148.
- [9] Латышев А.В., Юшканов А.А. // ТМФ. 1993. Т. 95. № 3. С. 530–540.