

УДК 533.601

© 2002 г. А.В. Латышев, А.А. Юшканов

ЗАДАЧА СМОЛУХОВСКОГО ДЛЯ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ГАЗОВ С УЧЕТОМ КОЭФФИЦИЕНТОВ АККОМОДАЦИИ ПОСТУПАТЕЛЬНОЙ И ВРАЩАТЕЛЬНОЙ ЭНЕРГИИ МОЛЕКУЛ

Исследуется влияние коэффициентов аккомодации энергии поступательного и вращательного движения молекул на величину скачка температуры в классической задаче Смолуховского. С использованием обобщения известного кинетического БКВ-уравнения (Больцман–Крук–Веландер) на случай молекулярных газов получено аналитическое решение этой задачи для двух- и многоатомных газов с учетом вращательных степеней свободы. Проведен численный анализ полученных результатов.

Несмотря на серьезные усилия, теоретическое описание микроскопических граничных условий при взаимодействии молекул газа с твердым телом остается весьма неполным даже для случая идеальных поверхностей и простых газов (без внутренних степеней свободы у молекул) [1]. Положение дел при описании молекулярных газов и реальных поверхностей еще существенно сложнее. Это приводит к тому, что по-прежнему актуальны феноменологические микроскопические граничные условия, использующие такие интегральные характеристики поверхности, как коэффициенты аккомодации [2].

Для молекулярных газов наряду с коэффициентами аккомодации поступательной энергии молекул, используемой в случае простого газа, необходимо учитывать коэффициент аккомодации внутренних степеней свободы. Имеются экспериментальные свидетельства в пользу того, что коэффициенты аккомодации внутренних степеней свободы молекул газа могут существенно отклоняться от единицы в практически важных случаях, так что их учет представляет особую важность [3, 4].

В данной работе рассматриваются относительно низкие температуры, при которых возбуждением колебательных степеней свободы молекул можно пренебречь [5]. В то же время при всех температурах, кроме экстремально низких, вращательные степени свободы можно рассматривать на классическом уровне [5].

Для случая простого газа влияние коэффициента аккомодации энергии было рассмотрено ранее [6]. В настоящей работе впервые рассматривается влияние коэффициентов аккомодации энергии поступательного и вращательного движения молекул, введенных ниже. При этом используется предложенное авторами кинетическое уравнение для молекулярного газа [7, 8] с постоянной частотой столкновений молекул. Отметим, что кинетическое уравнение для молекулярного газа с частотой столкновений, пропорциональной скорости молекул, введено авторами в [9].

Необходимо отметить, что случай молекулярного газа для данной задачи носит принципиально более сложный характер, чем случай простого газа [6]. Это связано с тем, что для простого газа учет закона сохранения энергии позволяет существенно упростить вычисление потока энергии, переносимого молекулами, падающими на стенку. Для молекулярных газов необходимо рассмотрение потоков как поступательной, так и вращательной энергии молекул. С помощью одного закона сохранения полной энергии упростить вычисление обоих этих потоков оказывается невозможным. При этом становится необходимым использование точной функции распределения молекул вблизи поверхности.

Под задачей Смолуховского (см., например, [2, 6, 9]) понимается задача нахождения скачка температуры в разреженном газе вблизи поверхности, когда вдали от поверхности задан градиент температуры.

1. Постановка задачи и ее решение. Пусть в полупространстве $x > 0$ вдали от поверхности раздела газ – твердое тело поддерживается постоянный градиент температуры K_t , ортогональный поверхности. Предположим, что градиент температуры мал, так что задача может быть рассмотрена в линейном приближении. Профиль температуры вне слоя Кнудсена имеет вид $T(x) = T_0 + K_t x$. Температуру поверхности обозначим через T_s . Величина $\Delta T = T_0 - T_s$ называется скачком температуры. В линейном приближении $\Delta T = C_t \lambda K_t$, λ – длина свободного пробега молекул, C_t – коэффициент скачка температуры. Удобнее ввести относительный скачок температуры

$$\varepsilon_t = \Delta T / T_s = C_t \lambda k_t, \quad k_t = K_t / T_s \quad (1.1)$$

Возьмем линеаризованное кинетическое уравнение (см. [8]) для молекулярных газов с постоянной частотой столкновений молекул ν_0 , записанное для случая, когда времена объемной релаксации энергии поступательных и вращательных степеней свободы близки. Подобное предположение выполняется для большинства молекулярных газов при комнатной температуре [10]. В дальнейшем будем использовать безразмерные переменные

$$c = \sqrt{\frac{m}{2kT_s}} v, \quad v = \sqrt{\frac{\tilde{J}}{2kT_s}} \omega, \quad x^* = \nu_0 \sqrt{\frac{m}{2kT_s}} x$$

Здесь k – постоянная Больцмана, v – скорость поступательного движения молекул газа, ω – скорость вращательного движения молекул газа; для двухатомной молекулы $\tilde{J} = J$, J – ее момент инерции, для трехатомной молекулы $\tilde{J} = J_1 \omega_1^2 + J_2 \omega_2^2 + J_3 \omega_3^2$, а J_i – главные моменты инерции трехатомной молекулы. В безразмерных переменных кинетическое уравнение запишется в виде (звездочку у координаты будем опускать)

$$c_x \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \varphi(x, c, v) = \int g(c, v; c', v') \varphi(x, c', v') d\Omega \quad (1.2)$$

Здесь

$$g = 1 + 2c_x c'_x + \frac{1}{l + 1/2} (c^2 + v^2 - l - 1/2)(c'^2 + v'^2 - l - 1/2)$$

$$d\Omega = 2^{2l-3} \pi^{1/2-l} \exp(-c^2 - v^2) v^{2l-3} dv d^3 c$$

(g – ядро уравнения (1.2)), $l = 2$ для двухатомного газа, $l = 5/2$ для N -атомного газа ($N \geq 3$).

Отметим, что линейные молекулы при возбуждении вращательных степеней свободы ведут себя как двухатомные молекулы [5]. Поэтому в дальнейшем не будем выделять особо этот случай, включая его в общий случай двухатомных молекул.

Рассмотрим граничное условие на стенке с учетом аккомодации поступательной и вращательной энергии [2, 3]

$$\varphi(0, c, v) = \varphi_0(c, v), \quad c_x > 0 \quad (1.3)$$

где

$$\varphi_0 = \varepsilon_n^r + \varepsilon_t^i (c^2 - 3/2) + \varepsilon_t^\omega (v^2 - l + 1) \quad (1.4)$$

$\varepsilon_n^r, \varepsilon_t^i, \varepsilon_t^\omega$ – неизвестные величины.

Граничное условие вдали от стенки представим в виде

$$\varphi(x, c, v) = \varphi_{as}(x, c, v) + o(1), \quad x \rightarrow \infty, \quad c_x < 0 \quad (1.5)$$

где

$$\varphi_{as} = k_i^* (x - c_x)(c^2 + v^2 - l - 3/2), \quad k_i^* = \frac{1}{v_0} \sqrt{\frac{2kT_s}{m}} k_i.$$

В дальнейшем звездочку у k_i^* будем опускать.

Введем коэффициенты аккомодации энергий, определяемых соответственно поступательными и вращательными степенями свободы,

$$\alpha_t = \frac{E_i^t - E_r^t}{E_i^t - E_s^t}, \quad \alpha_\omega = \frac{E_i^\omega - E_r^\omega}{E_i^\omega - E_s^\omega} \quad (1.6)$$

Здесь введены потоки энергий поступательного и вращательного движений молекул, падающих на стенку (индекс i), отраженных от стенки (индекс r), а также потоки от стенки, соответствующие термодинамическому равновесию стенки и газа,

$$\begin{aligned} E_i^t &= - \int_{c_x < 0} c^2 c_x \varphi(0, \mathbf{c}, v) d\Omega, \quad E_i^\omega = - \int_{c_x < 0} v^2 c_x \varphi(0, \mathbf{c}, v) d\Omega \\ E_r^t &= \int_{c_x > 0} c^2 c_x \varphi_0(\mathbf{c}, v) d\Omega, \quad E_r^\omega = \int_{c_x > 0} v^2 c_x \varphi_0(\mathbf{c}, v) d\Omega \\ E_s^t &= \int_{c_x > 0} c^2 c_x \varphi_s(0, \mathbf{c}, v) d\Omega, \quad E_s^\omega = \int_{c_x > 0} v^2 c_x \varphi_s(0, \mathbf{c}, v) d\Omega \\ \varphi_s(0, \mathbf{c}, v) &= \varepsilon_n + \varepsilon_t (c^2 + v^2 - l - 1/2), \quad c_x > 0 \end{aligned} \quad (1.7)$$

$\varphi_s(0, \mathbf{c}, v)$ – функция распределения с равновесными значениями параметров стенки, ε_n – неизвестная величина.

Условия непротекания через границу полупространства имеют вид

$$N_i = N_s, \quad N_i = N_r \quad (1.8)$$

Здесь

$$\begin{aligned} N_i &= - \int_{c_x < 0} c_x \varphi(0, \mathbf{c}, v) d\Omega, \quad N_r = \int_{c_x > 0} c_x \varphi_0(0, \mathbf{c}, v) d\Omega \\ N_s &= \int_{c_x > 0} c_x \varphi_s(0, \mathbf{c}, v) d\Omega \end{aligned}$$

(N_i – поток падающих молекул, N_r – поток отраженных молекул, N_s – поток молекул, соответствующий термодинамическому равновесию.)

Заметим, что второе слагаемое в выражении для ядра g не вносит вклад в правую часть уравнения (1.2), так как интеграл $\int c'_x \varphi d\Omega$ пропорционален потоку массы, который в данной задаче равен нулю. Множитель $c^2 + v^2 - l - 1/2$ в последнем слагаемом ядра g можно представить в виде суммы двух слагаемых, равных множителям при ε_t^t и ε_t^ω в выражении (1.4). Следовательно, функцию φ удобно искать в виде

$$\varphi = h_1(x, \mu) + (c^2 - 3/2)h_2(x, \mu) + (v^2 - l + 1)h_3(x, \mu), \quad \mu = c_x \quad (1.9)$$

Получим векторное уравнение

$$\mu \frac{\partial h}{\partial x} + h(x, \mu) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\mu'^2) (E + 2\mu\mu'F) K_0(\xi') h(x, \mu') d\mu' \quad (1.10)$$

Здесь

$$h(x, \mu) = \text{col}\{h_1(x, \mu), h_2(x, \mu), h_3(x, \mu)\}, \quad \xi = \xi(\mu) = \mu^2 - 1/2, \quad \xi' = \xi(\mu')$$

$$K_0(\xi) = \begin{vmatrix} 1 & \xi & 0 \\ \xi/(l+1/2) & (\xi^2+1)/(l+1/2) & l/5 \\ \xi/(l+1/2) & (\xi^2+1)/(l+1/2) & l/5 \end{vmatrix}, \quad F_0 = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}$$

E – единичная матрица 3×3 .

Граничные условия (1.3)–(1.5) преобразуются в следующие:

$$h(0, \mu) = h_0, \quad \mu > 0 \quad (1.11)$$

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

где

$$h_0 = \text{col}\{\varepsilon'_n, \varepsilon'_t, \varepsilon_t^\omega\}, \quad h_{as}(x, \mu) = k_t(x - \mu) \text{col}\{-1, 1, 1\} \quad (1.12)$$

Введем новую неизвестную функцию $h_4(x, \mu) = h_2(x, \mu) - h_3(x, \mu)$. Тогда вместо (1.10) получим следующую систему уравнений:

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial h_1}{\partial x} + h_1(x, \mu) &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\mu'^2) (1 + 2\mu\mu') [h_1(x, \mu') + \xi(\mu') h_2(x, \mu')] d\mu' \\ \mu \frac{\partial h_2}{\partial x} + h_2(x, \mu) &= \frac{1}{\sqrt{\pi}(l+1/2)} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\mu'^2) \{ (\xi(\mu') h_1(x, \mu') + \\ &+ [(\xi(\mu')^2 + l) h_2(x, \mu') - h_4(x, \mu)] \} d\mu' \\ \mu \frac{\partial h_4}{\partial x} + h_4(x, \mu) &= 0 \end{aligned} \quad (1.13)$$

Последнее уравнение имеет очевидное решение

$$h_4(x, \mu) = (\varepsilon'_t - \varepsilon_t^\omega) \exp(-x/\mu) (1 + |\mu|/\mu)/2 \quad (1.14)$$

Далее будем рассматривать систему первых двух уравнений (1.13), причем в последнем использовано выражение (1.14). Представим эту систему в векторном виде

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial h}{\partial x} + h(x, \mu) &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\mu'^2) (E + 2\mu\mu' F) K(\xi') h(x, \mu') d\mu' - \\ &- \left\| \begin{matrix} 0 \\ \gamma \end{matrix} \right\| \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \exp\left(-\mu'^2 - \frac{x}{\mu'}\right) d\mu', \quad h = \begin{vmatrix} h_1 \\ h_2 \end{vmatrix}, \quad \gamma = \frac{l}{5} (\varepsilon'_t - \varepsilon_t^\omega) \end{aligned} \quad (1.15)$$

Здесь E – единичная матрица 2×2 ,

$$F = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{vmatrix}, \quad K(\xi) = \begin{vmatrix} 1 & \xi \\ \xi/(l+1/2) & (\xi^2+1)/(l+1/2) \end{vmatrix}$$

Далее будем решать граничную задачу, состоящую из уравнения (1.15) и граничных условий вида (1.11), но теперь вместо выражений (1.12) в этих условиях будут фигурировать

$$h_0 = \text{col}\{\varepsilon'_n, \varepsilon'_t\}, \quad h_{as}(x, \mu) = k_t(x - \mu) \text{col}\{-1, 1\}$$

Назовем эту задачу задачей А.

2. Аналитическое решение задачи А. Разделение переменных в однородном уравнении, соответствующем (1.15),

$$h_\eta(x, \mu) = \exp(-x/\eta) \Phi(\eta, \mu)$$

где η – спектральный параметр, приводит к характеристическому уравнению

$$(\eta - \mu) \Phi(\eta, \mu) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \eta [n^{(0)}(\eta) + 2\mu E n^{(1)}(\eta) - \exp(-\eta^2) \operatorname{col}\{0, \gamma\}]$$

Здесь

$$n^{(j)}(\eta) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\mu^2) \mu^j K(\mu) \Phi(\eta, \mu) d\mu, \quad j = 0, 1 \quad (2.1)$$

Характеристическое уравнение после некоторых преобразований упрощается:

$$(\eta - \mu) \Phi(\eta, \mu) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} A(\eta), \quad A(\eta) = n^{(0)}(\eta) - \exp(-\eta^2) \operatorname{col}\{0, \gamma\} \quad (2.2)$$

Из уравнений (2.1) и (2.2) при $\eta \in (0, +\infty)$ находим собственные векторы [11]:

$$\Phi(\eta, \mu) = \Phi^{(0)}(\eta, \mu) A(\eta) + K^{-1}(\eta) \operatorname{col}\{0, \gamma\} \quad (2.3)$$

$$\Phi^{(0)}(\eta, \mu) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \eta P \frac{1}{\eta - \mu} E + \exp(\eta^2) B(\eta) \delta(\eta - \mu)$$

Здесь

$$B(z) = K^{-1}(z) \Lambda(z) = \lambda_c(z) E + \frac{1}{2l} Q(z)$$

$$\Lambda(z) = E + z \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\mu^2) K(\mu) \frac{d\mu}{\mu - z}$$

$$\lambda_c(z) = 1 - 2z \exp(-z^2) \int_0^z \exp(u^2) du \pm i\sqrt{\pi} z \exp(-z^2), \quad \pm \operatorname{Im} z > 0$$

$$Q(z) = \begin{vmatrix} -\xi(z) & l - \xi(z) \\ 1 & 1 \end{vmatrix}$$

Px^{-1} означает главное значение интеграла при интегрировании x^{-1} , $\delta(x)$ – дельта-функция Дирака, $\Lambda(z)$ – дисперсионная матрица.

Будем искать решение задачи А в виде разложения по собственным векторам (2.3)

$$h(x, \mu) = h_{\text{as}}(x, \mu) + \int_0^\infty \exp(-x/\eta) \Phi(\eta, \mu) d\eta$$

или, подробнее,

$$\begin{aligned} h(x, \mu) = & k_l(x - \mu) \begin{vmatrix} -1 \\ 1 \end{vmatrix} + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \exp\left(-\frac{x}{\eta}\right) \frac{\eta A(\eta)}{\eta - \mu} d\eta + \\ & + \left[\exp\left(\mu^2 - \frac{x}{\mu}\right) B(\mu) A(\mu) + \exp\left(-\frac{x}{\mu}\right) K^{-1}(\mu) \begin{vmatrix} 0 \\ \gamma \end{vmatrix} \right] \frac{\mu + |\mu|}{2\mu} \end{aligned} \quad (2.4)$$

Неизвестным в этих разложениях является вектор-функция $A(\eta) = \operatorname{col}\{A_1(\eta), A_2(\eta)\}$.

Подстановка выражения (2.4) в первое из граничных условий (1.11) приводит к сингулярному интегральному уравнению с ядром Коши

$$\left\| \begin{matrix} k_t \mu - \varepsilon'_n \\ -k_t \mu - \varepsilon'_t \end{matrix} \right\| + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{\eta A(\eta)}{\eta - \mu} d\eta + \exp(\mu^2) B(\mu) A(\mu) + K^{-1}(\mu) \left\| \begin{matrix} 0 \\ \gamma \end{matrix} \right\| = \left\| \begin{matrix} 0 \\ 0 \end{matrix} \right\|, \quad \mu > 0 \quad (2.5)$$

Подставим разложение (1.9) в выражение для N_i , равенство (1.4) подставим в выражение для N_r , а равенство (1.7) – в выражение для N_s . Получаем следующие соотношения:

$$N_i = \int_{c_x > 0} c_x [h_1(0, c_x) + \left(c^2 - \frac{3}{2}\right) h_2(0, c_x)] d\Omega - \int c_x \varphi(0, \mathbf{c}, \nu) d\Omega = N_r - \int c_x \varphi(0, \mathbf{c}, \nu) d\Omega$$

$$N_r = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{2} \varepsilon'_n + \frac{1}{4} \varepsilon'_t \right), \quad N_s = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{2} \varepsilon_n + \frac{1}{4} \varepsilon_t \right)$$

Из второго условия (1.8) вытекает, что полный поток равен нулю – это условие выполняется автоматически (проверяется непосредственно), а первое условие (1.8) дает равенство

$$\varepsilon_t - \varepsilon'_t - 2\varepsilon'_n - 2\varepsilon_n = 0$$

Перейдем к уравнениям (1.6). Для этих уравнений найдем

$$E'_s = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\varepsilon_n + \frac{3}{2} \varepsilon_t \right), \quad E_s^\omega = \frac{l-1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{2} \varepsilon_n + \frac{3}{4} \varepsilon_t \right)$$

$$E_r^\omega = \frac{l-1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{2} \varepsilon'_n + \frac{1}{4} \varepsilon'_t + \frac{1}{2} \varepsilon_t^\omega \right)$$

Поток энергии поступательного движения молекул, падающих на стенку, представим в виде

$$E'_i = -E'_0 + E'_r \quad (2.6)$$

$$\begin{aligned} E'_0 &= \int c^2 c_x \varphi d\Omega = \int c^2 c_x [h_1(0, c_x) + \left(c^2 - \frac{3}{2}\right) h_2(0, c_x)] d\Omega = \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^\infty \exp(-\mu'^2) \mu' [(\mu'^2 + 1) h_1(0, \mu') + \left(\mu'^4 + \frac{1}{2} \mu'^2 + \frac{1}{2}\right) h_2(0, \mu')] d\mu' \end{aligned}$$

Точно так же поток энергии вращательного движения молекул, падающих на стенку, выразим в виде

$$E_i^\omega = -E_0^\omega + E_r^\omega \quad (2.7)$$

$$E_0^\omega = \int \nu^2 c_x \varphi d\Omega = \frac{l-1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^\infty \exp(-\mu'^2) \mu' [h_1(0, \mu') + \left(\mu'^2 + \frac{1}{2}\right) h_2(0, \mu')] d\mu'$$

Для вычисления E'_0 и E_0^ω воспользуемся следующими представлениями:

$$h_j(0, \mu) = (-1)^{j+1} k_t \mu + \int_0^\infty [\Phi_{j1}^{(0)}(\eta, \mu) A_1(\eta) + \Phi_{j2}^{(0)}(\eta, \mu) A_2(\eta)] d\eta, \quad j = 1, 2$$

Обозначим

$$n_{mj}^{(2g+1)}(\eta) = \int_{-\infty}^\infty \exp(-\mu^2) \mu^{2g+1} \Phi_{mj}^{(0)}(\eta, \mu) d\mu, \quad g = 0, 1, 2; \quad m, j = 1, 2$$

Тогда выражение для потока поступательной энергии принимает вид

$$E_0^t = -\frac{5}{4}k_t + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \sum_{j=1}^3 A_j(\eta) \left[n_{1j}^{(1)}(\eta) + \frac{1}{2} n_{2j}^{(1)}(\eta) + n_{1j}^{(3)}(\eta) + \frac{1}{2} n_{2j}^{(3)}(\eta) + n_{2j}^{(5)}(\eta) \right] d\eta$$

Непосредственные вычисления показывают, что

$$n^{(1)}(\eta) = \frac{1}{2l} Q(\eta), \quad n^{(3)}(\eta) = -\frac{1}{2} \eta E + \frac{1}{2l} \eta^3 Q(\eta)$$

$$n^{(5)}(\eta) = \left(-\frac{3}{4} \eta - \frac{1}{2} \eta^3 \right) E + \frac{1}{2l} \eta^5 Q(\eta)$$

С помощью этих равенств находим, что

$$E_0^t = -\frac{5}{4}k_t - I, \quad E_0^\omega = -\frac{l-1}{2}k_t + I, \quad I = \frac{1-l^{-1}}{2\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \eta [A_1(\eta) + A_2(\eta)] d\eta$$

Теперь из равенств (1.6) с помощью выражений (2.6) и (2.7) получаем

$$(\alpha_\zeta^{-1} - 1)E_0^\zeta + E_r^\zeta - E_s^\zeta = 0, \quad \zeta = t, \omega$$

Далее найдем (см. [6–8]) аналитическое решение уравнения (2.5) и, вычислив с его помощью интеграл I , получим для определения всех неизвестных параметров недостающие уравнения

$$\begin{aligned} \alpha_2 &= (1-l^{-1})(-\epsilon_t^t + \epsilon_t^\omega) p_0, \quad q_0 \alpha_1 + q_1 \alpha_2 = k_t q_0^2 \\ l^{-1} \epsilon_t^t + (1-l^{-1}) \epsilon_t^\omega + (p_0 - q_0) \alpha_2 + p_0 \beta_0 &= p_1 p_0^{-1} k_t \\ -2^{-1} (1-l^{-1}) \epsilon_t^t + 2^{-1} (1-l^{-1}) \epsilon_t^\omega + \epsilon_n^r + (q_2 + q_0 - p_0) \alpha_2 + q_1 \alpha_1 + q_0 \alpha_0 - (p_0 - q_0) \beta_0 &= \\ &= -k_t q_0 (p_1 - q_1) \\ \mu_0 \alpha_1 - \alpha_0 + \delta \beta_0 &= -k_t \mu_0 \delta q_0 \quad (\alpha - \delta) \beta_{-1} = \mu_0^2 (\delta q_0 k_t - \alpha_1) \\ \mu_0^2 \alpha_2 + \mu_0 \alpha_1 + \alpha_0 - \alpha \beta_0 - \alpha' \beta_{-1} &= -\alpha \mu_0 q_0 k_t \\ (\alpha_t^{-1} - 1) [q_3 \alpha_2 + q_2 \alpha_1 + q_1 (\alpha_0 + \beta_0) + q_0 (1 + \alpha) \beta_{-1}] + \\ + \frac{1}{\sqrt{\pi} (1-l^{-1})} [2\epsilon_n^r + 3\epsilon_t^t - 2\epsilon_n - 3\epsilon_t] &= (\alpha_t^{-1} - 1) k_t \left[\frac{5}{2(1-l^{-1})} + q_0 q_2 \right] \\ (\alpha_w^{-1} - 1) [q_3 \alpha_2 + q_2 \alpha_1 + q_1 (\alpha_0 + \beta_0) + q_0 (1 + \alpha) \beta_{-1}] - \\ - \frac{l}{2\sqrt{\pi}} [2\epsilon_n^r + \epsilon_t^t + 2\epsilon_t^\omega - 2\epsilon_n - 3\epsilon_t] &= (\alpha_w^{-1} - 1) k_t (-l + q_0 q_2) \end{aligned} \quad (2.8)$$

В этих уравнениях

$$\begin{aligned} p_0 &= \exp(-S_2), \quad q_0 = 1/p_0, \quad p_1 = p_0(-R_1 - S_3), \quad q_1 = q_0(-R_1 + S_3) \\ q_2 &= q_0 \left(-R_2 + S_4 - \frac{3}{2} S_2 \right) + \frac{1}{2} q_1 (-R_1 + S_3), \quad q_3 = q_0 \left(-R_3 + S_5 - \frac{3}{2} S_3 \right) + \\ + \frac{2}{3} q_1 \left(-R_2 + S_4 - \frac{3}{2} S_2 \right) + \frac{1}{3} q_2 (-R_1 + S_3), \quad \delta &= \frac{1}{2} \left(r(0) - \frac{1}{2} \right) \\ \alpha &= -\frac{1}{2} \left(r(\mu_0) + \mu_0^2 + \frac{1}{2} \right), \quad \alpha' = -\frac{\mu_0}{r(\mu_0)} \left[r(\mu_0) + \mu_0^2 - \frac{3}{2} \right] \end{aligned}$$

Точка μ_0 находится из уравнения $S_1 = 0$ (частный случай задачи обращения Якоби для эллиптических интегралов), где

$$S_n = -\frac{1}{2\pi} \int_0^\infty \frac{\theta_1(u) - \theta_2(u)}{r(u)} u^{n-1} du - \int_0^{\mu_0} \frac{u^{n-1}}{r(u)} du$$

$$R_n = -\frac{1}{2\pi} \int_0^\infty (\theta_1(u) + \theta_2(u)) u^{n-1} du, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

$$\theta_j(u) = -\frac{\pi}{2} - \operatorname{arctg} \frac{\Omega_j(u)}{\sqrt{\pi u \exp(-u^2)}}, \quad r(z) = \sqrt{\left(z^2 - \frac{3}{2}\right)^2 + 4l}$$

$$\Omega_j(z) = \lambda_c(z) + \frac{1}{4l} \left(\frac{3}{2} - z^2 + (-1)^j r(z) \right), \quad j = 1, 2, \quad l = 2, \frac{5}{2}$$

Решение системы линейных уравнений (2.8) приводит к следующему выражению для скачка температуры:

$$\epsilon_t = D(\alpha_t, \alpha_\omega) k_t$$

где

$$D = 1.13019 \frac{1 - 0.44595\alpha_t - 0.04272\alpha_\omega + 0.00755\alpha_t\alpha_\omega}{0.36436\alpha_t + 0.18219\alpha_\omega - 0.02768\alpha_t\alpha_\omega}$$

для двухатомного газа и

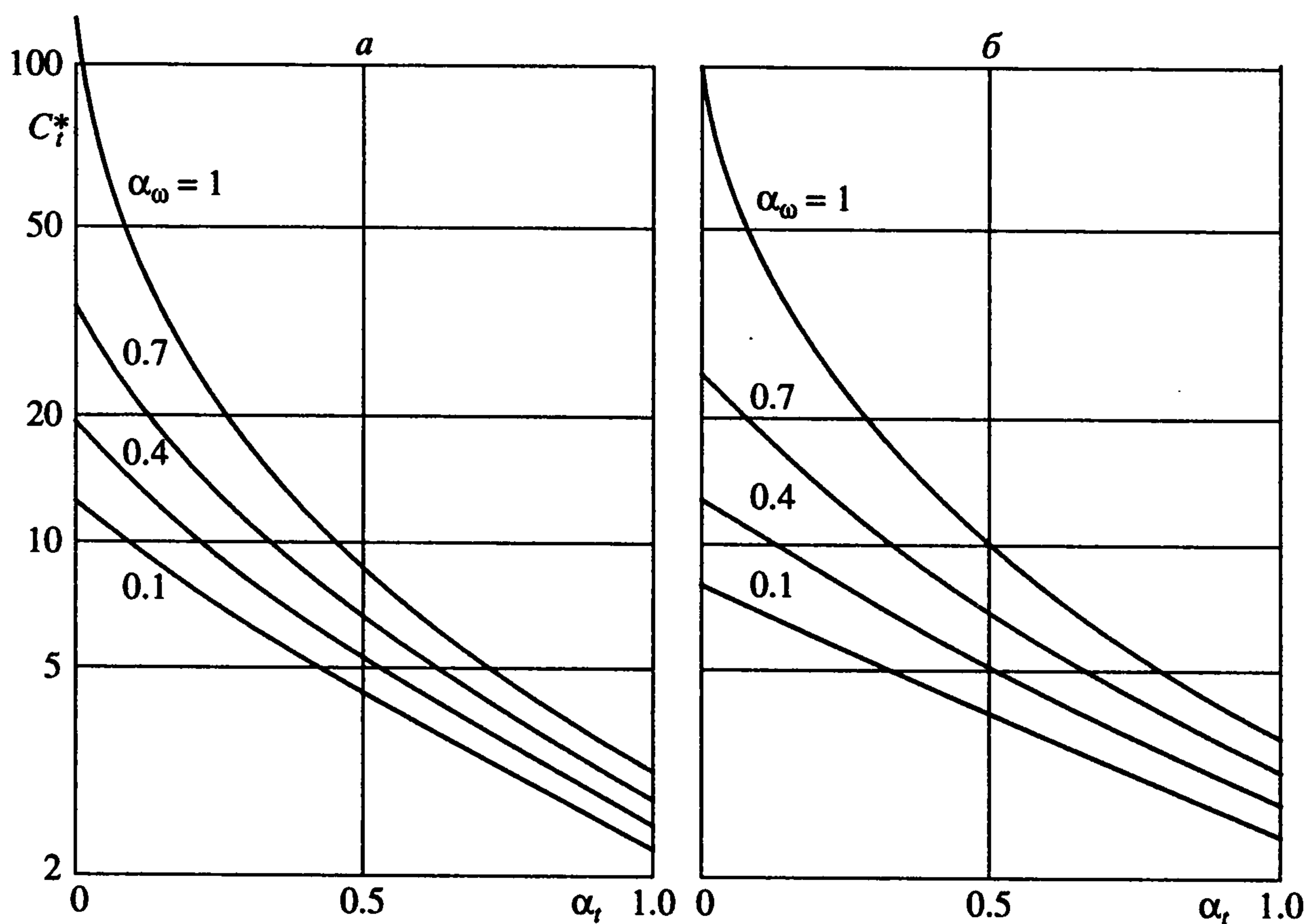
$$D = 1.19044 \frac{1 - 0.43332\alpha_t - 0.17771\alpha_\omega + 0.07572\alpha_t\alpha_\omega}{0.33582\alpha_t + 0.25186\alpha_\omega - 0.12298\alpha_t\alpha_\omega}$$

для многоатомного газа.

Отметим, что при $\alpha_t = \alpha_\omega = 1$ последние формулы соответственно дают: $\epsilon_t = 1.13019k_t$ для двухатомного газа и $\epsilon_t = 1.19044k_t$ для многоатомного газа, что в точности совпадает с известными результатами [8]. Воспользуемся определением длины свободного пробега [12] $\lambda = \eta \rho^{-1} (\pi m / (2kT_s))^{1/2}$, где η – динамическая вязкость, ρ – плотность газа. Это выражение может быть переписано в эквивалентном виде $\lambda = \chi \operatorname{Pr} (\pi m / (2kT_s))^{1/2}$, где χ – коэффициент температуропроводности, Pr – число Прандтля. При этом выражение для коэффициента C_t , введенного равенством (1.1), можно представить в виде $C_t = (2/3 \operatorname{Pr}) C_t^*$, где $C_t^* = 2.01497D(\alpha_t, \alpha_\omega)$ для двухатомного газа и $C_t^* = 2.11571D(\alpha_t, \alpha_\omega)$ для многоатомного газа.

Отметим, что при стремлении к нулю одной из величин α_t или α_ω скачки температуры молекулярного газа остаются конечными. Только при одновременном стремлении α_t и α_ω к нулю выражения для скачка температуры расходятся. Это связано с тем, что в последнем случае нарушается тепловой контакт между газом и твердым телом.

На фигуре представлена зависимость коэффициента температурного скачка двухатомного (а) и многоатомного (б) газа от коэффициента аккомодации α_t для различных значениях коэффициента α_ω . Из анализа графиков видно, что различие в поведении двух- и многоатомных газов растет при уменьшении коэффициента аккомодации вращательной энергии молекул. Это связано с тем, что уменьшение величины коэффициента аккомодации вращательной энергии молекул по-разному проявляется в случае двух- и многоатомных газов. Уменьшение величины α_ω сокращает теплообмен твердого тела с двумя степенями свободы двухатомного газа и с тремя степенями свободы многоатомного газа.



Величина скачка температуры в двухатомном газе для случая $\alpha_\omega = 0$, $\alpha_r = 1$ равна $\epsilon_r = 1.71854k$, что на 52% больше величины скачка температуры при полной аккомодации. Для многоатомного газа для аналогичного случая имеем $\epsilon_r = 2.00883k$, что на 69% больше величины скачка температуры при полной аккомодации. Из сравнения этих величин следует, что величина коэффициента аккомодации вращательной энергии молекул действительно сильнее сказывается на скачок температуры в многоатомном газе, чем в двухатомном.

Выведенные формулы для скачка температуры молекулярного газа можно использовать при анализе динамики умеренно крупных аэрозольных частиц, при анализе эксперимента по определению коэффициента теплопроводности молекулярных газов и в других задачах, связанных с теплообменом между молекулярным газом и твердым телом.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (99-01-00336).

ЛИТЕРАТУРА

1. Баранцев Р.Г. Взаимодействие разреженных газов с обтекаемыми поверхностями. М.: Наука, 1975. 343 с.
2. Коган М.Н. Динамика разреженного газа. Кинетическая теория. М.: Наука, 1967. 440 с.
3. Ларина И.Н., Рыков В.А. О граничных условиях для газов на поверхности тела // Изв. АН СССР. МЖГ. 1986. № 5. С. 141–148.
4. Рыков В.А. Модельное кинетическое уравнение для газа с вращательными степенями свободы // Изв. АН СССР. МЖГ. 1975. № 6. С. 107–115.
5. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. 5. Статистическая физика. М.: Наука, 1976. 584 с.
6. Латышев А.В., Юшканов А.А. Аналитическое решение модельного БГК-уравнения Больцмана в задаче о температурном скачке с учетом аккомодации энергии // Мат. моделирование. 1992. Т. 4. № 10. С. 41–46.

7. Латышев А.В., Юшканов А.А. Аналитическое решение задачи о скачке температуры в газе с вращательными степенями свободы // Теорет. и мат. физика. 1993. Т. 95. № 3. С. 530–540.
8. Latyshev A.V., Yushkanov A.A. Temperature jump and weak evaporation in polyatomic gas // Mathematical Models of Non-Linear Excitations, Transfer, Dynamics, and Control in Condensed Systems and Other Media. New York; Moscow: Kluwer Acad.; Plenum Publ., 1999. P. 3–16.
9. Латышев А.В., Юшканов А.А. Скачок температуры и слабое испарение в молекулярных газах // ЖЭТФ. 1998. Т. 114. Вып. 3. С. 956–971.
10. Жданов В.М., Алиевский М.Я. Процессы переноса и релаксации в молекулярных газах. М.: Наука, 1989. 335 с.
11. Владимиров В.С. Обобщенные функции в математической физике. М.: Наука, 1976. 280 с.
12. Cercignani C. Theory and Application of the Boltzmann Equation. Edinburg; London: Scottish Acad. Press, 1975 = Черчиньяни К. Теория и приложения уравнения Больцмана. М.: Мир, 1978. 495 с.

Москва
e-mail:latyshev@orc.ru

Поступила в редакцию
21.III.2001