ПМТФ, № 4, 1973

УДК 573.32

# О ТЕЧЕНИИ РЕЛАКСИРУЮЩЕГО ГАЗА ВБЛИЗИ ТВЕРДОЙ ПОВЕРХНОСТИ

*М. О. Луцет*

*(Новосибирск)*

В работе изучается поведение многоатомного релаксирующего газа вблизи твердой поверхности. Рассматривается случай, когда протяженность зоны релаксации значительно превышает длину свободного пробега между упругими столкновениями (затрудненный обмен поступательной и внутренней энергии). Показывается равномерная пригодность используемого асимптотического разложения функции распределения при определенных предположениях. Построено решение уравнений нулевого приближения и граничные условия для внешнего течения, основанные на этом решении и обобщенной модели диффузного отражения газа от поверхности. Последняя задача частично исследовалась в [1] методом Греда и в [2] с точки зрения анализа скачка температуры.

Кинетическое уравнение для многоатомных газов было получено путем формального обобщения уравнения Больцмана в [3] (ссылка из [4]). Используя обозначения [4], запишем

$$\frac{df_i}{dt} = \frac{\partial f_i}{\partial t} + \mathbf{V}_i \frac{\partial f_i}{\partial \mathbf{x}} = \sum_{j,\,k,\,l} \int (f_k' f_e' - f_i f_j) g_{ij} I_{ij}^{kl} (g, \theta, \Phi) \sin\theta \, d\theta d\Phi \, d\mathbf{V}_j \tag{1}$$

Индекс $i$ означает полный набор квантовых чисел $\{i_1, i_2, \ldots\}$, характеризующих внутреннее состояние молекулы. Сечения $I_{ij}{}^{kl}$ суть характеристики бинарного соударения. Пусть при $g_{ij} = g_{ij}'$ $I_{ij}{}^{ij} \sim \sigma_1$, $I_{ij}{}^{kl} \sim \sigma_2$ и при $g_{ij} \neq g_{kl}' I_{ij}{}^{kl} \sim \sigma_{12}$, $\sigma_1$ и $\sigma_{12}$, возможно, зависят от $i$, $j$; рассуждения нетрудно обобщить на этот случай.

Обычно $\sigma_1 \sim \sigma_2 \sim \sigma$. В дальнейшем будем различать два случая:

а) легкий обмен поступательной и внутренней энергии

$$\sigma_{12} \sim \sigma \tag{2}$$

б) затрудненный обмен

$$\sigma_{12} \ll \sigma \tag{3}$$

Приведем уравнение (1) к безразмерному виду. Для этого кроме обычных характерных величин введем линейный размер $L$, который в случае а) означает длину, где функция распределения претерпевает характерное изменение, и в случае б) $L = (n\sigma_{12})^{-1}$. Получим в случае б)

$$\begin{aligned} \frac{df_i}{dt} &= \frac{1}{\varepsilon} \sum_{j,\,k,\,l} \int (f_k' f_l' - f_i f_j) g_{ij} I_{ij}{}^{kl} \sin\theta \, d\theta \, d\Phi \, d\mathbf{V}_j + \\ &+ \sum_{j,\,k,\,l}{}' \int (f_k' f_l' - f_i f_j) g_{ij} I_{ij}{}^{kl} \sin\theta \, d\theta \, d\Phi \, d\mathbf{V}_j = \frac{1}{\varepsilon} J_i + J_i' \end{aligned} \tag{4}$$

$\varepsilon = (n\sigma L)^{-1} \ll 1$, знак $\Sigma$ относится к сумме по переходам, где $g = g'$, знак $\Sigma'$ — переходам с $g \neq g'$. В случае а) перед $\Sigma'$ стоит множитель $\varepsilon^{-1}$.

Информация о механизме взаимодействия многоатомных газов с твердой поверхностью ограничивается обычно коэффициентами аккомодации и некоторыми характеристиками адсорбции. Для простого газа получила распространение полуэмпирическая схема зеркально-диффузного отражения с различными коэффициентами аккомодации. Формулируя граничное условие для (4), воспользуемся общим функциональным соотношением, а конкретные расчеты проведем для обобщенной диффузной модели отражения.

На твердой поверхности потребуем выполнения условия

$$f_i^+ = \sum V_{ij} f_j^- \tag{5}$$

где плюс фиксирует молекулы, уходящие от поверхности, а минус —приходящие, $V_{ij}$ — линейный оператор, свойства которого будут оговорены ниже.

Будем искать решение уравнения (4) с условием (5) в случае $\varepsilon \to 0$. Методом, изложенным в [5], можно выделить структуру зависимости $f_i$ от $\varepsilon$ (из-за громоздкости здесь этот вывод не приводится). Функция $f_i$, кроме членов, пропорциональных степеням $\varepsilon$, содержит члены, характеризующие влияние границы, перед которыми стоит множитель порядка $\exp\{-\varepsilon^{-1}|\mathbf{x}-\mathbf{x}_*|\}$, где $\mathbf{x}$ — координата рассматриваемой точки, а $\mathbf{x}_*$ — координата пересечения траектории молекулы, приходящей в точку $\mathbf{x}$, с поверхностью. Введем на поверхности местную систему координат, направив одну из осей по нормали к поверхности $\mathbf{n}$. Можно показать (см. [5]), что влияние условия (5) сосредоточивается в области

$$x_n \lesssim \varepsilon \tag{6}$$

Эта область называется слоем Кнудсена. Наличие множителя порядка $\exp[-x_n/\varepsilon]$ приводит к экспоненциальному затуханию при $\varepsilon \to 0$ влияния границы на функцию распределения в любой фиксированной внутренней точке течения. Присутствие перед первой суммой в (4) (выделяющей интегралы и суммы по совокупности соударений, при которых энергия поступательного движения частиц не обменивается с энергией внутренних степеней свободы) большого параметра позволяет выделить быстрый и медленный процессы, которые определяют эволюцию последовательных приближений $f_i$ для $\varepsilon\to 0$. Явный вид нулевого и первого приближений функций распределения внутреннего течения различными методами получен в [6, 1]. Целью работы является нахождение равномерно пригодного разложения функции распределения (во внешнем течении и в слое Кнудсена) по малому параметру. Для этого, следуя [7], введем возмущенную координату

$$y = \varepsilon^{-1} x_n \tag{7}$$

аргументом в функцию распределения.

Ограничиваясь стационарным случаем, запишем уравнение Больцмана в виде

$$\frac{df_i}{dt} + \frac{1}{\varepsilon} V_n \frac{\partial f_i}{\partial y} = \frac{1}{\varepsilon} J_i + J_i' \tag{8}$$

где

$$\frac{df_i}{dt} = \mathbf{V}_\tau \frac{\partial f_i}{\partial \mathbf{x}_\tau} + V_n \frac{\partial f_i}{\partial x_n} \tag{9}$$

Когда $y$ принимает конечное значение, получаем точки слоя Кнудсена, когда $y \to \infty$ ($\varepsilon \to 0$ при фиксированном $x_n$) — область внешнего течения.

Решение уравнения (8) ищем в виде

(10) $$f_i = \sum_n \varepsilon^n f_i^{(n)}(\mathbf{x}, y)$$

Подставляя (10) в (8), для последовательных приближений имеем

(11) $$V_n \frac{\partial f_i^{(0)}}{\partial y} = J_i(f_i^{(0)}, f_j^{(0)})$$

(12) $$V_n \frac{\partial f_i^{(1)}}{\partial y} = J_i(f_i^{(0)}; f_j^{(1)}) + J_i'(f_i^{(0)}; f_j^{(0)}) + J_i(f_i^{(1)}; f_j^{(0)}) - \frac{df_i^{(0)}}{dt}$$

где $J_i$ — интеграл упругих столкновений, $J_i'$ — интеграл неупругих столкновений.

Ввиду линейности и независимости от $\varepsilon$ условий (5) они без изменения переносятся на последовательные приближения. Покажем, что уравнения для $f_i^{(n)}$ при $y \to \infty$ переходят в уравнения для последовательных приближений во внешнем течении [6], т. е. покажем равномерную пригодность разложения (10).

Введем обозначения

(13) $$J_i = -\nu_i(f_j) f_i + K_i(f_k; f_e)$$

где

(14) $$\nu_i = \sum_{jke} \int f_j g_{ij} I_{ij}^{ke} \sin\theta \, d\theta \, d\Phi \, d\mathbf{V}_j$$

$$K_i(f_k; f_e) = \sum_{j,\,k,\,e} \int f_k' f_e' g_{ij} I_{ij}^{kl} \sin\theta \, d\theta \, d\Phi \, d\mathbf{V}_j$$

Уравнения (11), (12) приведем к виду

(15) $$V_n \frac{\partial f_i^{(m)}}{\partial y} = -\nu_i(f_j^{(0)}) f_i^{(m)} + \Phi_i^{(m)}$$

(15) можно записать в интегральной форме для $V_n > 0$ и соответственно $V_n < 0$

(16) $$f_i^{(m)}(y) = f_i^{(m)}(0) \exp\left[-\frac{\nu_i}{V_n} y\right] + \int_0^y \frac{\Phi_i^{(m)}(z)}{V_n} \exp\left[-\frac{\nu_i}{V_n}(y - z)\right] dz$$

(17) $$f_i^{(m)}(y) = -\int_y^\infty \frac{\Phi_i^{(m)}(z)}{V_n} \exp\left[-\frac{\nu_i}{V_n}(y - z)\right] dz$$

$f_i^{(m)}(0)$ выбрано так, чтобы удовлетворялось граничное условие (5). Найдем предельные значения интегралов, входящих в (16), (17) при $y \to \infty$

$$A_1 = \int_0^y \frac{\Phi_i^{(m)}(z)}{V_n} \exp\left[-\frac{\nu_i}{V_n}(y - z)\right] dz$$

$$A_2 = \int_y^\infty \frac{\Phi_i^{(m)}(z)}{V_n} \exp\left[-\frac{\nu_i}{V_n}(y - z)\right] dz$$

При помощи замены $z = yt$ получим

$$A_1 = y\int_0^1 \frac{\Phi_i^{(m)}(yt)}{V_n}\exp\left[-\frac{\nu_i}{V_n}y(1-t)\right]dt$$

$$A_2 = y\int_1^\infty \frac{\Phi_i^{(m)}(yt)}{V_n}\exp\left[-\frac{\nu_i}{V_n}y(1-t)\right]dt$$

Подынтегральные выражения в этих интегралах заметно отличаются от нуля для больших $y$ только в области $1 - t \sim 1/y$. Благодаря множителю $y$ $A_1$ и $A_2$ стремятся при $y \to \infty$ к пределу, отличному от нуля. Предполагая ограниченность и непрерывность в бесконечно удаленной точке $\Phi_i^{(m)}$ и используя метод Лапласа [8], получим, что при $y \to \infty$

$$A_1 \to \nu_i^{-1}\Phi_i^{(m)}(\infty), \qquad A_2 \to \nu_i^{-1}\Phi_i^{(m)}(\infty)$$

Отсюда следует, что

$$f_i^{(m)} \to \frac{\Phi_i^{(m)}(\infty)}{\nu_i}, \qquad \frac{\partial f_i^{(m)}}{\partial y} \to 0$$

Дифференцируя (15) по $y$, можно тем же методом показать, что производная любого порядка от $f_i^{(m)}$ по $y$ тоже стремится к нулю при $y \to \infty$. Если сравнить уравнения (11), (12) ..., положив $\partial f_i^{(m)}/\partial y = 0$ с уравнениями внешнего течения, выписанными в работе [6], получим равномерную пригодность разложения (10).

Рассмотрим нулевое приближение (11) с условием на границе $(y = 0)$

(18) $$f_i^{(0)} = \sum_j V_{ij} f_j^{(0)}$$

Предельное решение $(y \to \infty)$ этой задачи известно, оно удовлетворяет уравнению

$$J_i(f_i^{(0)};\ f_j^{(0)}) = 0$$

и имеет вид [6]

(19) $$f_i^{(0)} = n\left(\frac{m}{2\pi kT_1}\right)^{3/2}\frac{1}{z}\exp\left\{-\frac{mc^2}{2kT_1} - \frac{E_i}{kT_2}\right\}$$

где $m$ — масса молекулы, $T_1$ — температура поступательных степеней свободы, $T_2$ — температура внутренних степеней свободы

$$z = \sum_i \exp\left\{-\frac{E_i}{kT_2}\right\}, \qquad n = \sum_i \int f_i\,d\mathbf{v}$$

$$\mathbf{c} = \mathbf{v} - \mathbf{U}, \qquad \mathbf{U} = \frac{1}{n}\sum_i \int f_i \mathbf{v}\,d\mathbf{v}$$

$n$, $u$, $T_1$, $T_2$ являются функциями внешней координаты $\mathbf{x}$.

Вычислим интеграл

(20) $$I = \sum_i \int_0^y \int_{(\mathbf{v})} V_n \frac{\partial f_i^{(0)}}{\partial y}[\ln f_i^{(0)} + 1]\,d\mathbf{v}\,dy$$

(21) $$I = \sum_i \int_0^y \frac{\partial}{\partial y}\int_{(\mathbf{v})} V_n f_i^{(0)} \ln f_i^{(0)}\,d\mathbf{v}\,dy = \sum_i \int_0^y \int_{(\mathbf{v})} J_i(f_i^{(0)} : f_j^{(0)})\,[\ln f_i^{(0)} + 1]\,d\mathbf{v}\,dy$$

Симметрия прямых и обратных столкновений дает известный из доказательства $H$-теоремы [4] результат

(22) $$I \leqslant 0$$

Кроме того

(23) $$I = \sum_i \Big[ \int_{(\mathbf{v})} V_n f_i^{(0)} \ln f_i^{(0)} \, d\mathbf{v} \Big] \Big|_{y=0}^{y}$$

Из (11) и условия непротекания на поверхности следует, что $u_n = 0$ при всех $y$. Учитывая (19), устремляем в (23) $y \to \infty$

(24) $$I(y \to \infty) = -\sum_i \Big[ \int_{(\mathbf{v})} V_n f_i^{(0)} \ln f_i^{(0)} \, d\mathbf{v} \Big] \Big|_{y=0}$$

Введем обозначения

$$\langle f_i(V_n) \rangle = f_i(-V_n), \quad f_i^{(0)} = f_{wi} \varphi_i, \quad P(\varphi_i) = \varphi_i (\ln \varphi_i + \ln f_{wi} - 1)$$

где $f_{wi}$ — положительная, четная по $V_n$, не зависящая от $y$ функция, удовлетворяющая условию (18). Конкретизируем вид оператора $V_{ij}$. Соотношение (18) связывает функцию распределения молекул, отраженных от поверхности (отметим ее плюсом) с функцией распределения падающих (минус), и заключает в себе информацию о механизме взаимодействия газа с поверхностью. Оператор $V_{ij}$ можно представить в виде

(25) $$\frac{1}{f_{wi}} V_{ij}(f_{wj}\varphi_j) = H_{ij}(\varphi_j^-) = \frac{1}{V_n f_{wi}} \int_{(V_{jn}<0)} |v_{jn}| \, T_{ij}(\mathbf{v}, \mathbf{v}_j) f_{wj} \varphi_j \, d\mathbf{v}_j$$

(26) $$\varphi_i^+ = \sum_j H_{ij} \varphi_j^-$$

Учитывая условие непротекания поверхности, условие нормировки $T_{ij}$ по $\mathbf{v}$, которые выполняются для любой функции $\varphi_i$, удовлетворяющей (26)

(27) $$\sum_i \int_{(\mathbf{v})} V_n f_{wi} \varphi_i \, d\mathbf{v} = -\sum_i \int_{(V_n<0)} V_n f_{wi} (\langle \varphi_i^+ \rangle - \varphi_i^-) \, d\mathbf{v} = 0$$

можем написать

(28) $$I = \sum_{i=0}^{\infty} \int_{(V_n<0)} V_n f_{wi} \Big\{ P\Big[\Big\langle \sum_j H_{ij}(\varphi_j^-) \Big\rangle\Big] - P(\varphi_i^-) \Big\} d\mathbf{v}$$

Подставляя в (27) $P(\varphi_i^-)$ вместо $\varphi_i^-$, имеем

(29) $$\sum_i \int_{(V_n<0)} V_n f_{wi} \Big\{ \sum_j \langle H_{ij} [P(\varphi_j^-)] \rangle - P(\varphi_i^-) \Big\} d\mathbf{v} = 0$$

Исключая $P(\varphi_i^-)$ из (28) по (29), окончательно получим

(30) $$I = \sum_i \int_{(V_n<0)} V_n f_{wi} \Big\{ P\Big[\Big\langle \sum_j H_{ij}(\varphi_j^-) \Big\rangle\Big] - \sum_j \langle H_{ij} [P(\varphi_j^-)] \rangle \Big\} d\mathbf{v}$$

При $\varphi > 0$ вторая производная $P$ по $\varphi$ больше нуля, следовательно, $P(\varphi)$ — выпуклая функция. Для выпуклых функций справедливо обобщенное неравенство Иенсена

$$P\left(\frac{\sum_j \int q_{ij}(t, x)\,\Phi_j(x)\,dx}{\sum q_{ij}(t, x)\,dx}\right) \leqslant \frac{\sum_j \int q_{ij}(t, x)\,P\,[\Phi_j(x)]\,dx}{\sum_j \int q_{ij}\,dx}$$

для произвольных $q_{ij} \geqslant 0$.

Полагая

$$\langle q_{ij}\rangle = \frac{1}{V_n f_{wi}}\,|V_{jn}|\,T_{ij}(\mathbf{v}, \mathbf{v}_j)\,f_{wj}, \quad \Phi_j = \varphi_j^-$$

и учитывая, что $f_{wi}$ удовлетворяет условию (18), получим для $V_n \leqslant 0$

$$P\left[\left\langle \sum_j H_{ij}(\varphi_j^-)\right\rangle\right] \leqslant \sum_j \langle H_{ij}\,[P(\varphi_j^-)]\rangle \tag{31}$$

Неравенство (31) вместе с $V_n \leqslant 0$ из (30) дает

$$I \geqslant 0 \tag{32}$$

Из (32) и (22) следует, что для всех $y$

$$I = 0 \tag{33}$$

Отрицательная определенность выражения [4]

$$\sum_i \int\limits_{(\mathbf{v})} J_i(f_i^{(0)};\, f_j^{(0)})\,[\ln f_i^{(0)} + 1]\,d\mathbf{v}$$

дает уравнение для $f_i^{(0)}$, справедливое для всех $y$

$$J_i(f_i^{(0)};\, f_j^{(0)}) = 0 \tag{34}$$

Отсюда получаем, что функция (19) является единственным решением задачи (11), (18), а параметры $n$, $\mathbf{U}$, $T_1$, $T_2$ не зависят от $y$. Таким образом, теорема единственности, доказанная для простого газа в [9][1], обобщается на рассматриваемый случай.

Следует отметить, что предположение о существовании $f_{wi}$, четной по $v_n$, весьма существенно. Физически это предположние означает существование такого состояния газа около поверхности, в котором распределение молекул, идущих к поверхности и от поверхности одинаково. Для модели зеркально-диффузного отражения такое состояние реализуется в равновесии, в остальных случаях это предположение нужно проверять, без него рассуждения теряют силу. Заметим также, что существование единственного решения нулевого приближения в слое Кнудсена сужает рамки моделирования закона взаимодействия газа с поверхностью и доказывает гипотезу, высказанную в [10] о необходимости согласования модели $T_{ij}$ и $f_i$ около твердой поверхности.

Для получения граничных условий к уравнениям первого приближения во внешнем течении [6] построим конкретную модель оператора $V_{ij}$. В [11] отмечено, что среднее время жизни молекулы в адсорбционном слое зависит от внутреннего состояния молекулы (из этого родилась идея адсорбционного газодинамического лазера). Кроме того,

[1] См. также Л у ц е т М. О. О постановке граничных условий в динамике слабо разреженного газа. Канд. дисс. Новосибирск, 1970.

малость времени пребывания молекулы в адсорбированном состоянии и различная скорость релаксации поступательной и внутренней энергии приводят к известному экспериментальному факту различия коэффициентов аккомодации поступательной и внутренней энергии. Эта информация позволяет обобщить диффузионный закон отражения введением различных коэффициентов аккомодации внутренней и поступательной энергии молекулы. Будем считать, что распределение молекул, отраженных от поверхности при $y = 0$ (т. е. для $V_n > 0$), записывается в виде

$$f_{wi} = n_w \left(\frac{m}{2\pi k T_{1w}}\right)^{3/2} \frac{1}{z_w} \exp\left\{-\frac{mv^2}{2kT_{1w}} - \frac{E_i}{kT_{2w}}\right\}$$

$$T_{1w} = \alpha\theta,\ T_{2w} = \beta\theta,\ z_w = \sum_i \exp\left(-\frac{E_i}{kT_{2w}}\right) \tag{35}$$

где $\theta$ — температура поверхности, $\alpha$, $\beta$ — соответствующие коэффициенты аккомодации, $n_w$ определяется из условия непротекания поверхности. Из (35) и решения уравнений нулевого приближения в слое Кнудсена получаем

$$\mathbf{u} = 0,\ T_1 = T_{1w} = \alpha\theta,\quad T_2 = T_{2w} = \beta\theta \tag{36}$$

Эти условия похожи на обычные условия прилипания в динамике вязкой жидкости. Уточнения условий (36), связанные с эффектами скольжения и температурного скачка появятся при рассмотрении следующего приближения, в котором нужно решить линейное неоднородное интегро-дифференциальное уравнение (12).

Поступила 4 XI 1972

ЛИТЕРАТУРА

1. *Жданов В. М.* К кинетической теории многоатомного газа. ЖЭТФ, 1967, т. 53, вып. 6.
2. *Lin J. T., Willis D. R.* Kinetic theory analysis of temperature jump in a polyatomic gas. Phys. Fluids, 1972, vol. 15, No. 1.
3. *Wang-Chang C. S., Uhlenbeck G. E.* Transport phenomena in polyatomic. Gases Univ. Michigan Engng. Res. Inst. Report CM-681, 1951.
4. *Гришфельдер Дж., Кертис Ч., Берд Р.* Молекулярная теория газов и жидкостей. М., Изд-во иностр. лит., 1961.
5. *Луцет М. О.* Вывод граничных условий для уравнений сплошной среды из кинетического уравнения. Численные методы механики сплошной среды, т. 2, № 3. Новосибирск, ВЦ СО АН СССР, 1971.
6. *Жигулев В. Н., Кузнецов В. М.* Некоторые проблемы физической аэродинамики. Тр. ЦАГИ, 1969, вып. 1136.
7. *Ван-Дайк М.* Методы возмущений в механике жидкости. М., «Мир», 1967.
8. *Копсон Э. Т.* Асимптотические разложения. М., «Мир», 1966.
9. *Guiraud J. P.* Kinetik theory and rarefied gas dynamiks. In: Rarefied Gas Dynamics, vol. 1. New York — London, Acad. Press, 1967.
10. *Баранцев Р. Г., Луцет М. О.* О граничных условиях для уравнений Навье — Стокса в разреженном газе. Докл. АН СССР, 1967, т. 173, № 5, стр. 1021—1023.
11. *Конюхов В. К., Прохоров А. М.* О возможности создания адсорбционно-газодинамического квантового генератора. Письма ЖЭТФ, 1971, т. 13, вып. 4, стр. 216—218.