ПМТФ, № 6, 1972

УДК 533.7

КНУДСЕНОВСКИЙ СЛОЙ В ТЕЧЕНИИ С ДВУХТЕМПЕРАТУРНОЙ РЕЛАКСАЦИЕЙ

М. М. Кузнецов

(Москва)

Рассматривается задача об определении граничных условий для гидродинамических уравнений движения сильно неравновесного двухатомного газа с колебательной релаксацией, которые были установлены в [1, 2].

Исследование кинетики идеального одноатомного газа показало, что определение граничных условий связано с решением кинетического уравнения Больцмана в так называемом кнудсеновском слое. Для решения аналогичной задачи в случае многоатомного газа с внутренними степенями свободы естественно воспользоваться обобщенным кинетическим уравнением Больцмана [1]

$$\mathbf{c}\frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} = \sum_{(N_1, N_1', N')} \int_{(P)} (f'f_1' - ff_1)\,\alpha dP \tag{1}$$

Здесь $f = f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, N)$, $\alpha dP = \alpha(g, \chi, b, N, N_1, N', N_1')\, bdbd\varepsilon d\mathbf{c}_1 d\mathbf{n}$, g — относительная скорость сталкивающихся частиц, ε и χ — углы между направлениями $\mathbf{g}$ и $\mathbf{n}$, $d\mathbf{n}$ — элемент телесного угла, отсчитываемого из центра частицы f_1, α — вероятность соударения двух молекул с изменением значений N, N_1 на N', N_1', $d\mathbf{c}_1$ — элемент пространства скоростей частицы f_1, суммирование идет по всем значениям номеров квантовых колебательных уровней и предполагается, что вырожденные состояния отсутствуют.

Помимо кинетического уравнения (1) необходимо задать функцию распределения f_e во внешней (по отношению к кнудсеновскому слою) области и граничное условие для функции f на поверхности тела. Функция f_e в случае плоского течения двухатомного газа имеет вид [2]

$$f_e = f^{(0)}(1 + \varphi_e), \quad f^{(0)} = n\left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2}\left[\sum_{(N)} \exp\left(-\frac{E_N}{kT_i}\right)\right]^{-1} \exp\left(-\frac{mC^2}{2kT} - \frac{E_N}{kT_i}\right),$$

$$\varphi_e = A_1(C, E_N, T, T_i)\,\mathbf{C}\frac{\partial T}{\partial \mathbf{r}} + A_2(C, E_N, T, T_i)\,\mathbf{C}\frac{\partial T_i}{\partial \mathbf{r}} + B(C, E_N, T, T_i) \times$$
$$\times\, \mathbf{C}^\circ\mathbf{C} : \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial \mathbf{r}} + A_3(C, E_N, T, T_i) \tag{2}$$

Здесь $\mathbf{C} = \mathbf{c} - \mathbf{V}$ — скорость хаотического движения, T, T_i — температуры поступательных и колебательных степеней свободы, A_1, A_2, A_3, B — скаляры, $\mathbf{C}^\circ\mathbf{C}$ — симметричный бездивергентный тензор, E_N — внутренняя колебательная энергия в состоянии N

$$\mathbf{C}\partial/\partial\mathbf{r} = C_x\partial/\partial x + C_y\partial/\partial y$$

$\mathbf{C}^\circ\mathbf{C} : \partial\mathbf{V}/\partial\mathbf{r}$ — бискалярное произведение тензоров $\mathbf{C}^\circ\mathbf{C}$ и $\partial\mathbf{V}/\partial\mathbf{r}$, (x, y, z) — прямоугольная система пространственных координат.

В качестве кинетического граничного условия примем, что часть $(1 - \sigma)$ падающих молекул отражается зеркально, а другая часть (σ) сначала адсорбируется, а затем испускается стенкой с распределением Максвелла—Больцмана $f^{(0)}$ при различных температурах T_w и T_{iw} поступательных и колебательных степеней свободы молекул

$$f^+(c_x, c_y, c_z, E_N) = (1-\sigma) f^-(c_x, -c_y, c_z, E_N) + \sigma \left(\frac{m}{2\pi k T_w}\right)^{3/2} \times \\ \times \left[\sum_{(N)} \exp\left(-\frac{E_N}{kT_i}\right)\right]^{-1} \exp\left(-\frac{mc^2}{2kT_w} - \frac{E_N}{kT_{iw}}\right) \tag{3}$$

Здесь (x, y, z) — прямоугольная система координат в плоском течении газа около поверхности $y = 0$ (ось y направлена по внешней нормали, ось x — в направлении течения).

Граничное условие (3) совпадает с точностью $0(\varphi_e)$ при $T_w = T_{iw}$ с условием, использованным в [3]. Заметим, что вывод граничных условий для многоатомного газа, данный в [3], не содержит анализа решения кинетического уравнения в кнудсеновском слое и поэтому не является строгим.

Применяя метод сращиваемых асимптотических разложений, нетрудно показать, что, как и в [4], функцию распределения в кнудсеновском слое можно искать в виде суперпозиции функции (2) и функции $f^{(0)}h$, удовлетворяющей линеаризованному кинетическому уравнению

$$c_y \frac{\partial h}{\partial y} = J(h), \quad J(h) \equiv \sum_{(N', N_1', N_1)} \int_{(P)} f_1^{(0)} (h' + h_1' - h - h_1)\, \alpha dP \tag{4}$$

Линеаризованный интеграл столкновений (4) для молекул, колеблющихся по законам гармонического осциллятора с одноквантовыми переходами, имеет следующий вид:

$$J(h) = \sum_{(N_1)} \int f_1^{(0)} \{[h'_{N+1} + h'_{N_1-1} - h_N - h_{N_1}[(N+1) N_1 p_{01} + \\ + [h'_{N-1} + h'_{N_1+1} - h_N - h_{N_1}](N_1+1) N p_{01} + [h_N' + h_{N_1}' - \\ - h_N - h_{N_1}][1 - N_1(N+1) p_{01} - N(N_1+1) p_{01}]\}\, dP \tag{5}$$

Здесь $p_{01}(g)$ — вероятность резонансного перехода осциллятора из основного состояния в первое возбужденное [5].

Решение уравнения (4) с интегральным оператором (5) будем искать в виде

$$h(\mathbf{c}, y, E_N) = \sum_{n=0}^{\infty} q^{(n)}(\mathbf{c}, y) P_N^{(n)}\left(\frac{E_N}{kT_i}\right) \tag{6}$$

Здесь $P_N^{(n)}(E_N / kT_i)$ — ортогональные полиномы, заданные на дискретном множестве значений E_N [6], причем

$$P_N^{(0)} = 1, \quad P_N^{(1)} = \frac{\varepsilon_i - E_N}{kT_i}, \quad \varepsilon_i = \langle E \quad \rangle$$

$$\langle E_N \rangle = \left[\sum_{(N)} E_N \exp\left(-\frac{E_N}{kT_i}\right)\right]\left[\sum_{(N)} \exp\left(-\frac{E_N}{kT_i}\right)\right]^{-1}, \qquad \langle P_N^{(1)2} \rangle = \frac{c_v}{k}$$

ε_i — средняя колебательная энергия, c_v — теплоемкость колебательных степеней свободы. Найдем матричное представление интеграла столкновений (5)

$$L^{(m)}(\mathbf{c}, y) = \left\langle P_N^{(m)} \sum_{n=0}^{\infty} J\left(q^{(n)} P_N^{(n)}\right) \right\rangle \qquad (m = 0, 1, \ldots) \tag{7}$$

Учитывая ортогональность комбинации

$$\langle N_1\rangle (N+1)[P_{N+1}^{(n)} - P_N^{(n)}] + \langle N_1+1\rangle\, N[P_{N-1}^{(n)} - P_N^{(n)}] \tag{8}$$

ко всем полиномам $P_N^{(m)}$ при $m \neq n$, получим

$$L^{(0)} = \int\limits_{(P)} f_M^{(0)}(c_1)[q^{(0)\prime} + q_1^{(0)\prime} - q^{(0)} - q_1^{(0)}]\,dP \tag{9}$$

$$L^{(1)} = \frac{c_v}{k}\int\limits_{(P)} f_M^{(0)}(c_1)[(1-p_{01})q^{(1)\prime} + p_{01}q_1^{(1)\prime} - q^{(1)}]\,dP \tag{10}$$

$$L^{(l)} = \langle P_N^{(l)2}\rangle \int\limits_{(P)} f_M^{(0)}(c_1)[(1-p_{01})q^{(l)\prime} - q^{(l)}]\,dP \tag{11}$$

Здесь $l = 2, 3, \ldots, f_M^{(0)}(c)$ — функция распределения Максвелла [7]. Таким образом, для каждого l имеем независимое кинетическое уравнение

$$c_y\frac{\partial q^{(l)}}{\partial y} = L^{(l)}(q^{(l)}) \tag{12}$$

Функция распределения φ_e, как и h, может быть задана в форме (6). Действительно [8]

$$A_1 = a_1(T, T_i)\,P_N^{(0)}\left(\frac{E_N}{kT_i}\right)S_{3/2}^{(1)}(\zeta^2), \qquad A_2 = a_2 P_N^{(1)} S_{3/2}^{(0)} \tag{13}$$

$$B = bP_N^{(0)}S_{5/2}^{(0)}, \qquad S_l^{(m)}(x) = \sum_{(j)}\frac{(-1)^j(m+l)!}{(m+j)!\,(l-j)!\,j!}x^j$$

$$\zeta = \frac{mC^2}{2kT}$$

Здесь $S_l^{(m)}(x)$ — полиномы Сонина [7].

Для определения скаляра A_3 необходимо решить следующее линейное интегральное уравнение [2]:

$$f^{(0)}\left(\frac{mC^2}{3k^2T^2} - \frac{1}{kT} - \frac{E_N - \varepsilon_i}{kT_i^2\varepsilon_i'}\right)\frac{\Omega}{n} + \sum{}'\Big|_{f=f^{(0)}} = J(A_3) \tag{14}$$

$$\Omega = \frac{\varepsilon(T) - \varepsilon_i(T_i)}{\tau}, \qquad \sum{}'\Big|_{f=f^{(0)}} = \sum_{(N',\,N_1',\,N_1)}\int\limits_{(P)}(f^{(0)\prime}f_1^{(0)\prime} - f^{(0)}f_1^{(0)})\,\alpha\,dP$$

Здесь Σ' — часть интеграла столкновений в (1), связанная с неупругим обменом квантами колебательной энергии, τ — время релаксации [9]. Ввиду ортогональности (для модели гармонического осциллятора [2, 9]) левой части уравнения (14) ко всем $P_N^{(m)}$, кроме $P_N^{(1)}$, $P_N^{(0)}$ и свойства (8), скаляр A_3 можно искать в виде

$$A_3 = P_N^{(1)}\left(\frac{E_N}{kT_i}\right)\sum_{(n)}^{\xi-1} a_3^{(n)}(T, T_i, \xi)\,S_{1/2}^{(n)}(\zeta^2) \tag{15}$$

Коэффициенты $a_3^{(n)}$ могут быть найдены из уравнения (14) по методу Ритца. В силу быстрой сходимости этого метода [8] целесообразно ограничиться первым, ненулевым коэффициентом в ряду (15). Тогда получим

$$a_3^{(1)} = -\frac{r_i}{c_v(T_i)\,T_i}\,\frac{\varepsilon(T) - \varepsilon_i(T_i)}{r_{il}} \tag{16}$$

Здесь r_i, r_{it} — величины, имеющие размерность длины, причем $r_i / /r_{it} \sim l_i / l_{it}$, где l_i и l_{it} — длины резонансного и неупругого обмена квантами энергии [1]

$$r_i = n\gamma v / I_5, \quad r_{it} = \tau v, \quad v = (8kT / \pi m)^{1/2}, \quad \gamma = \gamma(T, T_i)$$

$$\gamma(T, T_i) = \gamma_0 \left[\gamma_1 \exp\left(\frac{h\nu}{kT_i} - \frac{h\nu}{kT}\right) - 1\right]\left[\exp\left(\frac{h\nu}{kT_i}\right) - 1\right]^{-1}$$

$$\gamma_0 = \left[\frac{1}{2}\int\limits_0^\infty \exp(-G^2)(2 - G^2)\, p_{01}(G, G')\, G^3 dG\right]\left[\int\limits_0^\infty \exp(-G^2)\, p_{01}(G, G')\, G^3 dG\right]^{-1},$$

$$\gamma_1 = \left[\int\limits_0^\infty \exp(-G^2)(2 - G^2)\, p_{10}(G, G')\, G^3 dG\right]\left[\int\limits_0^\infty \exp(-G^2)(2 - G^2)\, p_{01} \times\right.$$

$$\left.\times (G, G')\, G^3 dG\right]^{-1}, \quad G = g / \sqrt{2kT / m}$$

$$I_5 = [S_{1/2}^{(1)}, S_{1/2}^{(1)}]_1, \quad [A, B]_1 = \int\limits_{(\zeta)} e^{-\zeta^2} A L^{(1)}(B)\, d\zeta$$

$p_{01}(G, G')$, $p_{10}(G, G')$ — вероятности перехода с первых уровней при неупругом столкновении [5, 9], штрих относится к величине G после столкновения.

Таким образом, суперпозиция решений $q^{(l)}$ уравнений (12) является полным решением уравнения (4) с граничными условиями (2), (3).

Легко видеть, что граничные условия скольжения и температурного скачка, определяемые с помощью $q^{(0)}$, будут такими же, как и в идеальном одноатомном газе.

Рассмотрим случай $l = 1$. В соответствии с упрощенным вариантом метода полупространственных полиномиальных разложений [10] функцию $q^{(1)}(y, \mathbf{c})$ представим в виде

$$q^{(1)}(y, \mathbf{c}) = q^{(1)}(y, \mathbf{c})\left(\frac{1 + \operatorname{sign} c_y}{2}\right) + q^{(1)}(y, \mathbf{c})\left(\frac{1 - \operatorname{sign} c_y}{2}\right) \qquad (17)$$

$$q^{(1)} = q_0^{(1)} + q_1^{(1)} + q_2^{(1)} + q_3^{(1)}, \quad q_0^{(1)\pm} = a_0^{\pm}(y), \quad q_1^{(1)\pm} = a_1^{\pm}(y)\,\zeta_y$$

$$q_2^{(1)\pm} = a_2^{\pm}(y)\,\zeta_y, \quad q_3^{(1)\pm} = a_3^{\pm}(y)\, S_{1/2}^{(1)}(\zeta^2)$$

где $a_i^{\pm}(y)$ удовлетворяют следующим моментным уравнениям:

$$\pm 2\frac{da_0^{\pm}}{dy} + \sqrt{\pi}\frac{da_1^{\pm}}{dy} = \pm(a_1^+ + a_1^-)\frac{I_2}{\pi} \pm (a_0^+ - a_0^-)\frac{I_1}{\pi}$$

$$\sqrt{\pi}\frac{da_0^{\pm}}{dy} \pm 2\frac{da_1^{\pm}}{dy} = (a_1^+ + a_1^-)\frac{I_3}{\pi} + (a_0^+ - a_0^-)\frac{I_2}{\pi} \pm (a_1^+ - a_1^-)\frac{I_4}{\pi} \qquad (18)$$

$$\pm 2\frac{da_2^{\pm}}{dy} = (a_2^+ + a_2^-)\frac{I_3}{\pi} \pm (a_2^+ - a_2^-)\frac{I_4}{\pi}$$

$$\pm\frac{9}{2}\frac{da_3^{\pm}}{dy} = (a_3^+ + a_3^-)\frac{I_5}{\pi} \pm (a_3^+ - a_3^-)\frac{I_6}{\pi}$$

Здесь

$$I_1 = [\operatorname{sign} c_y, \operatorname{sign} c_y]_1, \quad I_2 = [\operatorname{sign} c_y, c_y]_1, \quad I_3 = [c_y, c_y]_1$$

$$I_5 = [3/2 - c^2, 3/2 - c^2]_1, \quad I_4 = [c_y \operatorname{sign} c_y, c_y \operatorname{sign} c_y]_1$$

$$I_6 = [S_{1/2}^{(1)}(c^2)\operatorname{sign} c_y, S_{1/2}^{(1)}(c^2)\operatorname{sign} c_y]_1$$

Интегрируя систему обыкновенных дифференциальных уравнений (18), получим

$$a_0^{\pm} = b_0^{\pm} e^{-\alpha_1 y} + c_0, \quad a_1^{+} = b_1^{\pm} e^{-\alpha_1 y}$$

$$a_2^{\pm} = b_2^{\pm} e^{-\alpha_2 y}, \quad a_3^{\pm} = b_3^{\pm} e^{-\alpha_3 y} \qquad (19)$$

Постоянные $b_0^{\pm}$, $b_1^{\pm}$, $b_2^{\pm}$, $b_3^{\pm}$, c_0 определяются из граничных условий (3), (13), (15) и условия сохранения нормальной составляющей потока внутренней энергии

$$\int\limits_{(\mathbf{c})} f_M{}^{(0)} c_y \langle E_N h (y = 0) \rangle d\mathbf{c} = \int\limits_{(\mathbf{c})} f_M{}^{(0)} c_y \langle E_N h (y \to \infty) \rangle d\mathbf{c} \qquad (20)$$

(с точки зрения точного решения уравнения (12) при $l = 1$ условие (20) не является необходимым, так как оно следует из уравнения переноса энергии E_N), $\alpha_i > 0$ находятся из системы (18).

В силу (19) на верхней границе кнудсеновского слоя ($y \to \infty$) существует скачок температуры колебательных степеней свободы

$$\Delta T_i = \frac{kT_i}{c_v (T_i)} \int\limits_{(\mathbf{c})} f_M{}^{(0)} \left\langle h (\mathbf{c}, y \to \infty) P_N{}^{(1)} \left(\frac{E_N}{kT_i}\right) \right\rangle d\mathbf{c} \qquad (21)$$

$$\Delta T_i = \eta_1 (\sigma) \frac{\lambda_i (T_w, T_{iw})}{nvc_v (T_{iw})} \frac{\partial T_{iw}}{\partial y} + \eta_2 (\sigma) \frac{r_i}{c_v (T_{iw})} \frac{\varepsilon (T_w) - \varepsilon_i (T_{iw})}{r_{it}} \qquad (22)$$

Здесь $\eta_1 (\sigma)$, $\eta_2 (\sigma)$ — числовые коэффициенты, зависящие от параметра «диффузности» σ и потенциала межмолекулярного взаимодействия.

Первый член в формуле (22) может быть получен из элементарных соображений (правда, с другим коэффициентом $\eta_1 (\sigma)$), если допустить, что поток молекул, падающих на стенку, несет с собой энергию $\varepsilon_i = kT_i$.

Второй член в (22) нельзя получить подобным образом, ввиду того что процесс двухтемпературной релаксации не описывается элементарной теорией явлений переноса.

В заключение рассмотрим вывод граничных условий для течения в пограничном слое [2]. В этом случае функция распределения (2) не содержит скаляр A_3. Поэтому в (17), (18) необходимо положить $a_2^{\pm} = a_3^{\pm} = 0$. Интегралы $I_1 - I_4$ можно вычислить аналитически, используя для резонансных переходов модель столкновения, предложенную в [11]

$$I_1 = -[\sqrt{2} + \theta^2 (\sqrt{2} - {}^5/_4)] (\pi / l), \quad I_2 = -[1 + \pi / 4 + \theta^2 (\pi / 4 + {}^5/_6)] (\pi / l)$$

$$I_3 = -({}^2/_3) [1 - \theta^2] (\pi / l), \quad I_4 = -[{}^2/_3 - \sqrt{{}^2/_4} + \theta^2 ({}^2/_3 - \sqrt{{}^{34}/_{48}})] (\pi / l)$$

$$\theta^2 = (\alpha / \pi\nu)^2 (kT / m) \qquad (23)$$

Здесь $l = (\pi nd^2 \sqrt{2})^{-1}$, d — эффективный диаметр молекулы в виде твердого шарика с потенциалом Леннарда — Джонса [11], α — некоторая постоянная, подбираемая из характеристик потенциала Леннарда — Джонса [5], ν — частота кванта.

Коэффициент $\eta_1 (\sigma)$ в этом случае равен

$$\eta_1 (\sigma) = \left(\frac{\pi}{4} \frac{2 - \sigma}{\sigma} + 0.7052 - 0.9180\theta^2\right) \frac{(2 - \sigma) 4D / (1 - \theta^2)}{2 - \sigma - 1.783\sigma (1 - 1.9813\theta^2)} \qquad (24)$$

$$\eta_1 (1) = (0.8427 + 0.3866\theta^2) (2D / (1 - \theta^2)) \qquad (25)$$

$$D = \frac{3}{8nd^2} (kT / \pi m)^{1/2}$$

Здесь D — коэффициент самодиффузии [7].

Нетрудно видеть, что наличие резонансных переходов приводит к увеличению коэффициента η_1 на величину $\sim \theta^2$.

Таким образом, в пограничном слое при $(1 - T_{iw}/T_w) \sim 1$ (случай сильно «неравновесной стенки») условия скольжения и скачок температуры поступательных степеней свободы такие же, как и в одноатомном, идеальном газе. Кроме того, имеется скачок температуры колебательных степеней свободы ΔT_i, обусловленный в общем случае как градиентом температуры T_i, так и процессом релаксации.

При $T_w = T_{iw}$ (случай «равновесной стенки») в силу (22) получим, что часть ΔT, обусловленная переносом внутренней энергии, пропорциональна только $\lambda_i (T_w)\, \partial T_w / \partial y$. Это согласуется с результатом работы [3] (с точностью до коэффициента $\eta_1 (\sigma)$), если учесть, что коэффициент объемной вязкости ζ, фигурирующий в формуле для ΔT ((43) в [3]), для рассматриваемой модели среды равен нулю [2].

Поступила 17 IV 1972

ЛИТЕРАТУРА

1. Жигулев В. Н. Уравнения движения неравновесной среды с учетом излучения. Инж. ж., 1964, т. 4, вып. 2, стр. 231—241.
2. Жигулев В. Н. Об уравнениях движения неравновесной среды с учетом излучения. Инж. ж., 1964, т. 4, вып. 3, стр. 431—438.
3. Жданов В. М. К кинетической теории многоатомного газа. ЖЭТФ, 1967, т. 53, вып. 6, стр. 2099—2108.
4. Кузнецов М. М. Об аналитическом решении уравнения Больцмана в кнудсеновском слое. ПМТФ, 1971, № 4, стр. 136—139.
5. Шварц Р. Н., Славский З. И., Герцфельд К. Ф. Расчет времени колебательной релаксации в газах. Сб. «Газодинамика и теплообмен при наличии химических реакций», М., Изд-во иностр. лит., 1962, стр. 299.
6. Waldmann L., Trübenbacher E., Formale Kinetische Theorie von Gasgemischen aus anregbaren Molekülen. Z. Naturforsch., 1962, Bd 17a, Nr 5, S. 363.
7. Чепмен С., Каулинг Т. Математическая теория неоднородных газов. М., Изд-во иностр. лит., 1960.
8. Кузнецов В. М. Кинетические коэффициенты в теории двухтемпературной колебательной релаксации. Изв. АН СССР, Механика, 1965, № 3, стр. 178—181.
9. Егоров Б. В. О релаксационном уравнении для колебательных степеней свободы двухатомного газа. Изв. АН СССР, Механика, 1965, № 3, стр. 176, 177.
10. Яламов Ю. И., Ивченко И. Н., Дерягин Б. В. Функция распределения газовых молекул по скоростям вблизи твердой стенки в неоднородно нагретом газе. Докл. АН СССР, 1961, т. 175, № 3, стр. 549—552.
11. Самуйлов Е. В. К вопросу о влиянии внутренних степеней свободы частиц на коэффициенты переноса многокомпонентной смеси газов. Сб. «Физическая газодинамика», М., Изд-во АН СССР, 1959, стр. 59—69.