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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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]

$$A_1 = a_1(T, T_i)\,P_N{}^{(0)}\left(\frac{E_N}{kT_i}\right)S_{3/2}{}^{(1)}(\zeta^2), \qquad A_2 = a_2P_N{}^{(1)}S_{3/2}{}^{(0)} \tag{13}$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

(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

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

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

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]

$$I_1 = -[\sqrt{2} + \theta^2(\sqrt{2} - {}^5/_4)](\pi/l), \quad I_2 = -[1 + \pi/4 + \theta^2(\pi/4 + {}^5/_6)](\pi/l)$$
$$I_3 = -({}^2/_3)[1 - \theta^2](\pi/l), \quad I_4 = -[{}^2/_3 - \sqrt{{}^2/_4} + \theta^2({}^2/_3 - \sqrt{{}^{34}/_{48}})](\pi/l)$$
$$\theta^2 = (\alpha/\pi\nu)^2(kT/m) \tag{23}$$

Здесь $l = (\pi n d^2 \sqrt{2})^{-1}$, 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

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

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

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

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