

УДК 533.72

АНАЛИТИЧЕСКОЕ ВЫЧИСЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ МОЛЕКУЛЯРНОГО ГАЗА НА ПОВЕРХНОСТИ В ЗАДАЧЕ СМОЛУХОВСКОГО

А. В. Латышев, А. А. Юшканов

Московский государственный педагогический университет, 107005 Москва

Приведено аналитическое решение классической задачи Смолуховского о скачке температуры в молекулярных газах (одно-, двух- и многоатомных). Газ занимает полупространство над плоской стенкой, вдали от которой заданы постоянные градиент температуры и скорость испарения с поверхности раздела газ — конденсированная фаза. В явном виде построена функция распределения как в полупространстве, так и на его границе. Получены формулы для концентрации и температуры на границе, а в случае двух- и многоатомных газов — формулы для температур, определяемых поступательными и вращательными степенями свободы молекул. Проведены численные расчеты.

Введение. Классическая задача Смолуховского о скачке температуры и концентрации разреженного газа над плоской поверхностью, когда вдали от поверхности задан перпендикулярный поверхности градиент температуры, исследуется в течение длительного времени (см., например, [1, 2], а также библиографию в [3]). С этой задачей тесно связана задача о слабом испарении (конденсации) — нахождение скачков температуры и концентрации, если задана постоянная скорость испарения (конденсации) в полупространство насыщенного пара.

В настоящее время для исследования теплообмена и испарения широко используется уравнение Бхатнагара — Гросса — Крука (БГК-уравнение). Так, в работах [4, 5] с его использованием численно решена задача об испарении простого (одноатомного) газа в вакуум с цилиндрических и сферических поверхностей в широком диапазоне чисел Кнудсена.

Задача Смолуховского для простого газа с использованием БГК-уравнения аналитически решена в работах [3, 6, 7]. Кинетическая модель для двухатомного газа предложена в [8], для многоатомного — в [9]. В [9] также получены точные выражения для скачков температуры и концентрации для двух- и многоатомных газов и проведены численные расчеты. Открытым остался вопрос об определении поступательной и вращательной температур. Следует отметить, что вдали от поверхности эти температуры совпадают.

Будем полагать, что относительный перепад температуры на длине свободного пробега много меньше единицы: $lK \ll 1$ (l — длина свободного пробега молекул, K — логарифмический градиент температуры), а скорость испарения (конденсации) U много меньше скорости звука. При выполнении этих предположений кинетическое уравнение может быть линеаризовано.

В настоящей работе в явном виде построена функция распределения одно-, двух- и многоатомных газов. Приводятся общие формулы для скачков температуры и концентрации для одно-, двух- и многоатомных газов. Аналитически получены точные формулы для относительной концентрации и температуры, определяемой поступательными и вращательными степенями свободы. По точным формулам проведены численные расчеты.

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

Следует отметить, что в работе [10] скачки температуры и концентрации находились вариационным методом для случая потенциалов Леннарда — Джонса и потенциалов $n(r)-6$, а в работе [11] эти величины, а также параметры простого газа вблизи поверхности вычислялись численным методом на основе уравнения Больцмана для молекул — твердых сфер. В работе [12] изучалось поведение газа между двумя параллельными плоскостями, на которых происходит испарение или конденсация. Основное внимание уделялось промежуточному режиму по числу Кнудсена.

Рассмотрим одно-, двух- или многоатомный газ, занимающий полупространство $x > 0$ над плоской поверхностью конденсированной фазы. На поверхности могут происходить процессы испарения и конденсации. Вдали от поверхности имеется градиент температуры, перпендикулярный ей. Введем декартову систему координат с центром на поверхности, причем область, заполненная газом, соответствует положительным значениям x . Тогда $T = T_1 + Ax$, $x \rightarrow \infty$, где $A = (dT/dx)_{x=\infty}$. Обозначим температуру поверхности через T_s , тогда скачок температуры $\Delta T = T_1 - T_s$. В линейном приближении скачок температуры пропорционален градиенту температуры: $\Delta T = C_t l A$, где C_t — неизвестный коэффициент пропорциональности, называемый коэффициентом скачка температуры. Вдали от поверхности возможно также движение газа (пара) к поверхности или от нее, что соответствует конденсации или испарению. В этом случае в линейном приближении концентрация и температура газа могут быть найдены из следующих соотношений:

$$\varepsilon_n = \frac{n - n_s}{n_s} = N_1 U, \quad \varepsilon_t = \frac{T - T_s}{T_s} = N_2 U.$$

Здесь n_s — концентрация насыщенного пара при температуре T_s .

Обе задачи (о скачках температуры и концентрации) при наличии как градиента температуры вдали от стенки, так и постоянного потока массы будем называть задачей Смолуховского, так как они незначительно различаются лишь граничными условиями.

1. Функция распределения в полупространстве и на его границе. Для одноатомного газа задача Смолуховского состоит в нахождении решения БГК-уравнения

$$C_x \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \varphi(x, \mathbf{C}) = \int k(\mathbf{C}; \mathbf{C}') \varphi(x, \mathbf{C}') dm, \quad (1.1)$$

удовлетворяющего граничным условиям

$$\varphi_{x=0} = 0, \quad C_x > 0; \quad \varphi_{x \rightarrow \infty} = \varphi_{as} + O(1), \quad C_x < 0. \quad (1.2)$$

Здесь $dm = \pi^{-3/2} \exp(-C^2) d^3 C$; $k(\mathbf{C}, \mathbf{C}') = 1 + 2C_x C'_x + (2/3)(C^2 - 3/2)(C'^2 - 3/2)$; $\varphi_{as} = \varepsilon_n + 2UC_x + \varepsilon_t(C^2 - 3/2) + K(x - C_x)(C^2 - 5/2)$; ε_t — скачок температуры; ε_n — скачок концентрации.

Для двух- и N -атомного газа ($N > 2$) задача Смолуховского состоит в решении уравнения [6]

$$C_x \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \varphi(x, \mathbf{C}, \nu) = \int k(\mathbf{C}, \nu; \mathbf{C}', \nu') \varphi(x, \mathbf{C}', \nu') dm$$

с ядром

$$k(\mathbf{C}, \nu; \mathbf{C}', \nu') = 1 + 2C_x C'_x + \frac{1}{l + 1/2} (C^2 + \nu^2 - l - 1/2)(C'^2 + \nu'^2 - l - 1/2)$$

($l = 2$ для двухатомного газа, $l = 5/2$ для многоатомного газа) и граничными условиями (1.2), в которых

$$\varphi_{as} = \varepsilon_n + 2UC_x + \varepsilon_t(C^2 + \nu^2 - l - 1/2) + K(x - C_x)(C^2 + \nu^2 - l - 3/2),$$

причем для двухатомного газа

$$dm = 2\pi^{-3/2} \exp(-C^2 - \nu^2) \nu d\nu d^3C,$$

а для многоатомного

$$dm = \pi^{-3} \exp(-C^2 - \nu^2) d^3\nu d^3C.$$

Здесь ν — безразмерная угловая скорость вращения молекулы ($0 < \nu < \infty$).

В случае одноатомного газа решение задачи (1.1) и (1.2) ищется в виде

$$\varphi(x, \mathbf{C}, \nu) = h_1(x, \mu) + (C^2 - 3/2)h_2(x, \mu), \quad \mu = C_x,$$

в случае N -атомного газа ($N \geq 2$) — в виде

$$\varphi(x, \mathbf{C}, \nu) = h_1(x, \mu) + (C^2 + \nu^2 - l - 1/2)h_2(x, \mu).$$

Для всех газов (одно-, двух- и многоатомных) задача Смолуховского сводится к решению векторного уравнения

$$\mu \frac{\partial h}{\partial x} + h(x, \mu) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\mu'^2) K_0(\mu, \mu') h(x, \mu') d\mu' \quad (1.3)$$

(относительно вектор-столбца с элементами h_1 и h_2) с граничными условиями

$$h(0, \mu) = \mathbf{0}, \quad 0 < \mu < \infty, \quad \mathbf{0} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}; \quad (1.4)$$

$$h(x, \mu) = h_{as}(x, \mu) + O(1), \quad x \rightarrow \infty, \quad \mu < 0. \quad (1.5)$$

Здесь

$$h_{as}(x, \mu) = \begin{bmatrix} \varepsilon_n + 2U\mu - K(x - \mu) \\ \varepsilon_t + K(x - \mu) \end{bmatrix}, \quad K_0(\mu, \mu') = \left[E + 2\mu\mu' \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \right] K(\mu'),$$

E — единичная матрица,

$$K(\mu) = \begin{bmatrix} 1 & \mu^2 - 1/2 \\ 2/(2l + 1)(\mu^2 - 1/2) & 2/(2l + 1)[(\mu^2 - 1/2)^2 + l] \end{bmatrix},$$

причем $l = 1$ для одноатомного газа, $l = 2$ для двухатомного газа, $l = 5/2$ для N -атомного газа ($N \geq 3$).

2. Аналитическое решение задачи Смолуховского. Согласно общему методу Фурье разделение переменных в уравнении (1.3) приводит к выражению

$$h_\eta(x, \mu) = \exp(-x/\eta) \Phi(\eta, \mu), \quad (2.1)$$

где η — спектральный параметр, или параметр разделения, в общем случае комплексный. Подстановка (2.1) в уравнение (1.3) приводит к характеристическому уравнению

$$(\eta - \mu) \Phi(\eta, \mu) = \eta \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\mu'^2) K_0(\mu, \mu') \Phi(\eta, \mu') d\mu'. \quad (2.2)$$

Будем считать, что $\Phi(\eta, \mu)$ удовлетворяет условию

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\mu'^2) K_0(\mu, \mu') \Phi(\eta, \mu') d\mu' = E. \quad (2.3)$$

Из уравнений (2.2) и (2.3) при $\eta \in (-\infty, \infty)$ в пространстве обобщенных функций [13] находим собственную матрицу-функцию

$$\Phi(\eta, \mu) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \eta P \frac{1}{\eta - \mu} E + \exp(\eta^2) B(\eta) \delta(\eta - \mu). \quad (2.4)$$

Здесь Px^{-1} — распределение (главное значение интеграла при интегрировании x^{-1}); $\delta(x)$ — дельта-функция Дирака; $B(z) = K^{-1}(z)\Lambda(z)$; $\Lambda(z)$ — дисперсионная матрица-функция задачи:

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

$$B(z) = \lambda_c(z)E + \frac{1}{2l} Q(z); \quad Q(z) = \begin{bmatrix} 1/2 - z^2 & 1/2 + l - z^2 \\ 1 & 1 \end{bmatrix};$$

$\lambda_c(z)$ — дисперсионная функция Черчиньяни:

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

В работах [8, 9] показано, что задача (1.3)–(1.5) имеет единственное решение, представимое в виде разложения по собственным матрицам характеристического уравнения

$$h(x, \mu) = h_{as}(x, \mu) + \int_0^{\infty} \exp\left(-\frac{x}{\eta}\right) \Phi(\eta, \mu) A(\eta) d\eta, \quad (2.5)$$

т. е.

$$h(x, \mu) = h_{as}(x, \mu) + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \exp\left(-\frac{x}{\eta}\right) \Phi(\eta, \mu) A(\eta) d\eta + \exp\left(\mu^2 - \frac{x}{\mu}\right) B(\mu) A(\mu) \theta_+(\mu). \quad (2.6)$$

Здесь $A(\mu)$ — неизвестная вектор-функция с элементами $a_1(\mu)$ и $a_2(\mu)$; $\theta_+(\mu)$ — функция Хевисайда; $\theta_+(\mu) = 1$ при $\mu > 0$, $\theta_+(\mu) = 0$ при $\mu < 0$.

При доказательстве разложения (2.5) найдены значения температурного скачка и скачка концентрации

$$\varepsilon_t = \delta_t K + \gamma_t(2U), \quad \varepsilon_n = \delta_n K + \gamma_n(2U). \quad (2.7)$$

Здесь $\delta_t = -p_1/p_0 + \mu_0(1 + \delta_1 D)$; $\gamma_t = 2\mu_0 p_0^2 D$; $\delta_n = -\delta_t + \mu_0 q_0^2 \delta_1(2 + \delta_1 D)$; $\gamma_n = q_1/q_0 - \gamma_t + \mu_0(1 + \delta_1 D)$; $D = 4(3\mu_0^2/2 - r(0)r(\mu_0) - r^2(0))/[r(\mu)(r(\mu_0) + \mu_0^2 + r(0))^2]$; $r(x) = \sqrt{q(x)}$; $q(x) = (x^2 - 3/2)^2 + 4l$; $\delta_1 = r(0)/2 + 3/4$; точка μ_0 определяется из уравнения $B_1 + R_1(\mu_0) = 0$ (частный случай задачи обращения Якоби для эллиптических интегралов);

$$B_n = -\frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} \frac{b(\tau)}{r(\tau)} \tau^{n-1} d\tau; \quad R_n(\mu_0) = -\int_0^{\mu_0} \frac{\tau^{n-1}}{r(\tau)} d\tau;$$

$$b(\tau) = \theta_1(\tau) - \theta_2(\tau); \quad p_1/p_0 = -A_1 - B_3 - R_3(\mu_0);$$

$$q_1/q_0 = -A_1 + B_3 + R_3(\mu_0); \quad A_n = -\frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} a(\tau) \tau^{n-1}, \quad n = 1, 2, 3, \dots;$$

Газ	Задача Смолуховского		Задача о слабом испарении	
	δ_t	δ_n	γ_t	γ_n
Одноатомный	1,302 72	-0,744 28	-0,223 37	-0,842 64
Двухатомный	1,215 89	-0,674 05	-0,154 81	-0,894 47
Многоатомный	1,190 44	-0,657 06	-0,133 35	-0,910 42

$$a(\tau) = \theta_1(\tau) + \theta_2(\tau) - 2\pi; \quad \theta_j(\tau) = \arg \Omega_j^+(\tau); \quad \theta_j(0) = 0;$$

$$\Omega_j(z) = \lambda_c(z) + (3/2 - z^2)/(4l) + (-1)^{j-1}r(z)/(4l), \quad j = 1, 2.$$

Соотношения (2.7) являются решением задачи Смолуховского. Приведем результаты численных расчетов по этим формулам в безразмерном виде (см. таблицу).

Из результатов, приведенных в таблице, следует, что скачок температуры C_t при числе Прандтля $Pr = 2/3$ имеет следующие значения: 2,204 94 для одноатомного газа, 2,057 98 для двухатомного, 2,014 90 для многоатомного. Длина свободного пробега l определялась согласно [2].

В [8, 9] найдена также неизвестная вектор-функция $A(\mu)$:

$$2\sqrt{\pi}i\mu A(\mu) = [X^+(\mu) - X^-(\mu)]\Psi(\mu). \tag{2.8}$$

Здесь $X(z)$ — матрица, факторизующая коэффициент однородной краевой задачи Римана — Гильберта, к решению которой сводится доказательство разложения (2.5) или (2.6). Матрица $X(z)$ содержит следующие элементы:

$$X_{11}(z) = \frac{1}{2} \left[U_1(z) \left(1 - \frac{z^2 + 1/2}{r(z)} \right) + U_2(z) \left(1 + \frac{z^2 + 1/2}{r(z)} \right) \right],$$

$$X_{12}(z) = -\frac{z^2 - l - 1/2}{r(z)} [U_1(z) - U_2(z)], \quad X_{21}(z) = \frac{1}{r(z)} [U_1(z) - U_2(z)],$$

$$X_{22}(z) = \frac{1}{2} \left[U_1(z) \left(1 + \frac{z^2 + 1/2}{r(z)} \right) + U_2(z) \left(1 - \frac{z^2 + 1/2}{r(z)} \right) \right].$$

Вектор-столбец $\Psi(\mu)$ имеет элементы

$$\Psi_1(z) = \alpha_1 z + \alpha_0 + \frac{\alpha_{-1}}{z - \mu_0}, \quad \Psi_2(z) = \beta_1 z + \beta_0 + \frac{\beta_{-1}}{z - \mu_0}.$$

В выражения для $X_{ij}(z)$ входят функции $U_j(z) = \exp[-A(z) + (-1)^j r(z)(B(z) + R(\mu_0, z))]$, $j = 1, 2$, где

$$A(z) = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty \frac{a(\tau)}{\tau - z} d\tau, \quad R(\mu_0, z) = \int_0^{\mu_0} \frac{d\tau}{r(\tau)(\tau - z)}, \quad B(z) = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty \frac{b(\tau)}{r(\tau)} \frac{d\tau}{\tau - z}.$$

Из соотношения (2.4) можно получить

$$\int_{-\infty}^\infty \exp(-\mu^2) \Phi(\eta, \mu) d\mu = E + \frac{1}{2l} Q(\eta).$$

Следовательно, согласно (2.5)

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^\infty \exp(-\mu^2) h(x, \mu) d\mu = \begin{bmatrix} \varepsilon_n - Kx \\ \varepsilon_t + Kx \end{bmatrix} + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \exp\left(-\frac{x}{\eta}\right) \left[E + \frac{1}{2l} Q(\eta) \right] A(\eta) d\eta. \tag{2.9}$$

3. Концентрация и температура в одноатомном газе. В одноатомном газе концентрация и температура определяются соотношениями

$$n(x) = \int f d^3v, \quad T(x) = \frac{2}{3kn(x)} \int f \frac{m}{2} (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 d^3v$$

или, с использованием функции φ ,

$$\frac{n(x)}{n_0} = 1 + \pi^{-3/2} \int \exp(-C^2) \varphi(x, \mathbf{C}) d^3C,$$

$$\frac{T(x)}{T_0} = 1 + \frac{2}{3} \pi^{-3/2} \int \exp(-C^2) \left(C^2 - \frac{3}{2}\right) \varphi(x, \mathbf{C}) d^3C.$$

Последние два соотношения выразим через h_1 и h_2 :

$$\frac{n(x)}{n_0} = 1 + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\mu^2) \left[h_1(x, \mu) + \left(\mu^2 - \frac{1}{2}\right) h_2(x, \mu) \right] d\mu; \quad (3.1)$$

$$\frac{T(x)}{T_0} = 1 + \frac{2}{3} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\mu^2) \left\{ \left(\mu^2 - \frac{1}{2}\right) h_1(x, \mu) + \left[\left(\mu^2 - \frac{1}{2}\right)^2 + 1 \right] h_2(x, \mu) \right\} d\mu. \quad (3.2)$$

Введем вектор-столбец $L(x) = \begin{bmatrix} n(x)/n_0 \\ T(x)/T_0 \end{bmatrix}$. Равенства (3.1) и (3.2) запишем в векторном виде

$$L(x) = 1 + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\mu^2) K(\mu) h(x, \mu) d\mu. \quad (3.3)$$

Подстановка разложения (2.5) или (2.6) в (3.3) приводит к следующему распределению концентрации и температуры в полупространстве:

$$L(x) = 1 + \begin{bmatrix} \varepsilon_n - Kx \\ \varepsilon_t + Kx \end{bmatrix} + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \exp\left(-\frac{x}{\eta}\right) A(\eta) d\eta.$$

Аналитическими методами можно найти точные значения концентрации и температуры на границе полупространства, т. е. при $x = 0$. Используя (2.8), получим

$$L(0) = 1 + \begin{bmatrix} \varepsilon_n \\ \varepsilon_t \end{bmatrix} + \frac{1}{2\pi i} \int_0^{\infty} [X^+(\eta) - X^-(\eta)] \Psi(\eta) \frac{d\eta}{\eta}.$$

Запишем без вывода (см. [14]) интегральное представление

$$X(z)\Psi(z) = h_{as}(0, z) + \frac{1}{2\pi i} \int_0^{\infty} [X^+(\eta) - X^-(\eta)] \Psi(\eta) \frac{d\eta}{\eta - z}.$$

С использованием этого представления получим $L(0) = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} + \lim_{z \rightarrow 0} X(z)\Psi(z)$.

Следует отметить, что выражение $z^2 U_2(z)$ имеет конечный предел в нуле, так как функция $U_2(z)$ имеет в нуле полюс второго порядка. Обозначим $\lim_{z \rightarrow 0} z^2 U_2(z) = \gamma$. Дисперсионную функцию представим в виде

$$\lambda(z) = \frac{2l}{2l+1} \Omega_1(z)\Omega_2(z).$$

В то же время можно доказать (см., например, [15]), что

$$\lambda(z) = \frac{2l + 3}{4(2l + 1)U_1(z)U_1(-z)[U_2(z)z^2][U_2(-z)(-z)^2]},$$

откуда следует

$$\gamma = \frac{1}{2U_1(0)} \sqrt{\frac{2l + 3}{2l + 1}}, \quad l = 1, 2, 5/2.$$

Знак радикала выбирается из условия непрерывности функции $U_1(z)$. Обозначим

$$X(z)\Psi(z) = F(z) = \begin{bmatrix} f_1(z) \\ f_2(z) \end{bmatrix}.$$

Вычислим предел

$$\lim_{z \rightarrow 0} X(z)\Psi(z) = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \end{bmatrix} \equiv F.$$

В [9] показано, что $\varphi(0) = 0$, где $\varphi(z) = -\Psi_1(z) + \delta(z)\Psi_2(z)$; $\delta(z) = [r(z) - z^2 - 1/2]/2$. Следовательно, $\Psi_1(0) = \delta\Psi_2(0)$, где $\delta = \delta(0) = r(0)/2 - 1/4$. Значит,

$$F = \Psi_2(0) \lim_{z \rightarrow 0} X(z) \begin{bmatrix} \delta \\ 1 \end{bmatrix} = \Psi_2(0) \lim_{z \rightarrow 0} \begin{bmatrix} \delta X_{11}(z) + X_{12}(z) \\ \delta X_{21}(z) + X_{22}(z) \end{bmatrix}.$$

Используя выражения для элементов матрицы $X(z)$, найдем искомые пределы:

$$f_1 = \Psi_2(0) \left[\delta U_1(0) + \gamma \frac{2(\delta + 1)(2\delta + 1)}{(4\delta + 1)^2} \right], \quad f_2 = \Psi_2(0) \left[U_1(0) - \gamma \frac{4(\delta + 1)}{(4\delta + 1)^2} \right].$$

Таким образом, окончательно находим значения концентрации и температуры на стенке:

$$\frac{n(0)}{n_0} = 1 + \delta U_1(0)\Psi_2(0) + \gamma\Psi_2(0) \frac{2(\delta + 1)}{(4\delta + 1)^2}; \quad (3.4)$$

$$\frac{T(0)}{T_0} = 1 + U_1(0)\Psi_2(0) - \gamma\Psi_2(0) \frac{4(\delta + 1)}{(4\delta + 1)^2}. \quad (3.5)$$

Здесь согласно [14]

$$\Psi_2(0) = \beta_0 - \frac{\beta_{-1}}{\mu_0} = \mu_0 q_0 (1 + \delta_1 D_1) K + \mu_0 p_0 D_1 (2U),$$

$$D_1 = D - \frac{1}{\alpha - \delta} = 2 \frac{\mu_0^2 - r(0)}{r(\mu_0)[r(\mu_0) + \mu_0^2 + r(0)]}.$$

4. Концентрация и температура поступательных и вращательных степеней свободы в N -атомном газе ($N \geq 2$). Макрохарактеристики N -атомного газа ($N \geq 3$) определяются соотношениями [9, 14]

$$n = \int f d^3\omega d^3v, \quad T_v = \frac{2}{3kn} \int f \frac{m}{2} (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 d^3\omega d^3v,$$

$$\mathbf{u} = \frac{1}{n} \int f \mathbf{v} d^3\omega d^3v, \quad T_\omega = \frac{2}{3kn} \int f \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 J_i \omega_i^2 d^3\omega d^3v.$$

Здесь $\boldsymbol{\omega} = (\omega_1, \omega_2, \omega_3)$ — вектор размерной угловой скорости вращения молекул; J_1, J_2, J_3 — моменты инерции молекулы.

В случае двухатомного газа молекула имеет один момент инерции J , поэтому макрохарактеристики двухатомного газа определяются выражениями [8, 9]

$$n = \int f \omega d\omega d^3v, \quad T_v = \frac{2}{3kn} \int f \frac{m}{2} (\mathbf{v} - \mathbf{u}) \omega d\omega d^3v,$$

$$\mathbf{u} = \frac{1}{n} \int f \mathbf{v} \omega d\omega d^3v, \quad T_\omega = \frac{2}{3kn} \int f \frac{1}{2} J \omega^2 \omega d\omega d^3v.$$

Далее случаи двухатомного и N -атомного газов ($N \geq 3$) будем рассматривать совместно. Следует отметить, что в рассматриваемых случаях распределение концентрации в полупространстве (3.1) приводит к тому же выражению для определения концентрации на стенке (см. (3.4)).

Распределения температуры поступательных и вращательных степеней свободы с использованием h_1 и h_2 можно представить в виде

$$\frac{T_v(x)}{T_0} = 1 + \frac{2}{3} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\mu^2) \left\{ \left(\mu^2 - \frac{1}{2} \right) h_1(x, \mu) + \left[\left(\mu^2 - \frac{1}{2} \right)^2 + 1 \right] h_2(x, \mu) \right\} d\mu;$$

$$\frac{T_\omega(x)}{T_0} = 1 + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\mu^2) h_2(x, \mu) d\mu. \quad (4.1)$$

Согласно (3.3) имеем

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\mu^2) K(\mu) h(0, \mu) d\mu = \begin{bmatrix} \varepsilon_n \\ \varepsilon_t \end{bmatrix} + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} A(\eta) d\eta = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \end{bmatrix}.$$

С использованием выражения для ε_t из этого равенства получим значение поступательной температуры

$$\frac{T_v(0)}{T_0} = 1 + \frac{2l+1}{3} f_2 - (l-1) \frac{2}{3} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\mu^2) h_2(0, \mu) d\mu. \quad (4.2)$$

Осталось найти значение вращательной температуры на стенке, т. е. значение выражения (4.1) при $x = 0$. На основании (2.9) при $x = 0$ имеем

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\mu^2) h(0, \mu) d\mu = \begin{bmatrix} \varepsilon_n \\ \varepsilon_t \end{bmatrix} + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} R(\eta) A(\eta) d\eta, \quad (4.3)$$

где $R(\eta) = E + Q(\eta)/(2l) = R_0 + R_2\eta^2$,

$$R_0 = \begin{bmatrix} 1 + 1/(4l) & (l + 1/2)/(2l) \\ 1/(2l) & 1 + 1/(2l) \end{bmatrix}, \quad R_2 = -\frac{1}{2l} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Разлагая матрицу $X(z)$ и вектор $\Psi(z)$ при $|z| \rightarrow \infty$ в асимптотические ряды $X(z) = X_0 + X_1/z + \dots$, $\Psi(z) = z\Psi_1 + \Psi_0 + \Psi_{-1}/z + \dots$ и используя метод контурного интегрирования, получим следующее интегральное представление:

$$R(z)[X(z)\Psi(z) - h_{as}(z)] - R_2(X_0\Psi_{-2} + X_1\Psi_{-1} + X_2\Psi_0) -$$

$$- zR_2(X_0\Psi_{-1} + X_1\Psi_0 + X_2\Psi_1) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} R(\eta) \frac{\eta A(\eta)}{\eta - z} d\eta.$$

Отсюда при $z = 0$

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} R(\eta) A(\eta) d\eta = R_0 \begin{bmatrix} f_1 - \varepsilon_n \\ f_2 - \varepsilon_t \end{bmatrix} - R_2(X_0\Psi_{-2} + X_1\Psi_{-1} + X_2\Psi_0). \quad (4.4)$$

Подставив (4.4) в (4.3) и используя выражение для $f_2 - \varepsilon_t$ из (4.4), получим

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\mu^2) h_2(0, \mu) d\mu = -\frac{1}{2l} (\varepsilon_n + \varepsilon_t) + \frac{1}{2l} f_1 + \frac{2l+1}{2l} f_2. \quad (4.5)$$

Для нахождения значений поступательной и вращательной температур подставим (4.5) в (4.2) и (4.1) при $x = 0$:

$$\frac{T_v(0)}{T_0} = 1 + \frac{l-1}{3l} (\varepsilon_n + \varepsilon_t) - \frac{l-1}{3l} f_1 + \frac{2l+1}{3l} f_2; \quad (4.6)$$

$$\frac{T_\omega(0)}{T_0} = 1 - \frac{1}{2l} (\varepsilon_n + \varepsilon_t) + \frac{1}{2l} f_1 + \frac{2l+1}{2l} f_2. \quad (4.7)$$

ЗАМЕЧАНИЕ. При $l = 1$ в формуле (4.6) отсутствуют второе и третье слагаемые, и она совпадает с формулой (3.5) для одноатомного газа.

Приведем результаты численных расчетов. Для одноатомного газа на основании формул (3.5) и (3.4) имеем $T(0)/T_0 = 1 + 0,853\,51K - 0,409\,58U$, $n(0)/n_0 = 1 - 0,396\,57K - 1,322\,26U$.

Формулы (4.6), (4.7) и (3.4) для двухатомного газа дают следующие результаты: $T_v(0)/T_0 = 1 + 0,821\,49K - 0,339\,38U$, $T_\omega(0)/T_0 = 1 + 0,770\,28K - 0,136\,76U$, $n(0)/n_0 = 1 - 0,382\,07K - 1,353\,94U$.

Наконец, для N -атомного газа ($N \geq 3$) из формул (4.6), (4.7) и (3.4) следует: $T_v(0)/T_0 = 1 + 0,811\,74K - 0,319\,75U$, $T_\omega(0)/T_0 = 1 + 0,761\,72K - 0,117\,19U$, $n(0)/n_0 = 1 - 0,378\,40K - 1,362\,65U$.

Заключение. Параметры одноатомного газа вблизи поверхности вычислялись в ряде работ (см. [11, 12]). В работе [12] определены параметры газа между плоскостями в случае испарения или конденсации. Однако результаты работы [12] представлены в виде, который не позволяет провести непосредственное сравнение с результатами настоящей работы. Приведем результаты [11], полученные для одноатомного газа на основе численного решения уравнения Больцмана для молекул — твердых сфер (пересчитанные в обозначениях данной работы): $T(0)/T_0 = 1 + 0,8650K - 0,4036U$, $n(0)/n_0 = 1 - 0,4141K - 1,3074U$, $\varepsilon_t = 1,2487K - 0,4556U$, $\varepsilon_n = -0,6789K - 1,6856U$. Сравнение результатов [11] с результатами настоящей работы показывает, что в задаче Смолуховского различие значений скачка температуры составляет 4%, скачка концентрации — 8%; в задаче о слабом испарении различие значений скачка температуры составляет 2%, скачка концентрации — 0,02%. Следует отметить, что в работе [16] численными методами найдено значение температурного скачка для одноатомного газа $\varepsilon_t = 1,3027$, что совпадает с приведенным выше значением.

Полученные в данной работе формулы для скачка температуры молекулярного газа можно использовать при анализе динамики умеренно крупных аэрозольных частиц, при анализе измерений коэффициента теплопроводности молекулярных газов и в других задачах о теплообмене между молекулярным газом и конденсированной фазой.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Коленчиц О. А.** Тепловая аккомодация систем газ — твердое тело. Минск: Наука и техника, 1977.
2. **Черчиньяни К.** Теория и приложения уравнения Больцмана. М.: Мир, 1978.
3. **Латышев А. В., Юшканов А. А.** Аналитическое решение задачи о скачках температуры и плотности пара над поверхностью при наличии градиента температуры // Прикл. математика и механика. 1994. Т. 58, вып. 2. С. 70–76.
4. **Sugimoto H., Sone Y.** Numerical analysis of steady flows of a gas evaporating from its cylindrical condensed phase on the basis of kinetic theory // Phys. Fluids A. 1992. V. 4. P. 419–440.
5. **Sone Y., Sugimoto H.** Kinetic theory analysis of steady evaporating flows from a spherical condensed phase into a vacuum // Phys. Fluids A. 1993. V. 5. P. 1491–1511.
6. **Латышев А. В., Юшканов А. А.** Точные решения уравнения Больцмана с оператором столкновений БГК в задаче о слабом испарении // Мат. моделирование. 1990. Т. 2, № 6. С. 55–63.
7. **Долгошеина Е. Б., Латышев А. В., Юшканов А. А.** Точные решения модельного БГК-уравнения в задачах о скачке температуры и слабом испарении // Изв. АН СССР. Механика жидкости и газа. 1992. № 1. С. 163–172.
8. **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.
9. **Latyshev A. V., Yushkanov A. A.** Temperature jump and weak evaporation in a polyatomic gas // Mathematical models of non-linear excitations, transfer, dynamics, and control in condensed systems and other media. N. Y. etc.: Kluwer Acad./Plenum Publ., 1999. P. 3–16.
10. **Loyalka S. K.** Slip and jump coefficients for rarefied gas flows: variational results for Lennard — Jones and $n(r)$ -6 potentials // Physica A. 1990. V. 163. P. 813–821.
11. **Loyalka S. K.** Kinetic theory of planar condensation and evaporation // Transport Theory Statist. Phys. 1991. V. 90, N 2/3. P. 237–249.
12. **Aoki K., Mazukawa N.** Gas flows caused by evaporation and condensation on two parallel condensed phases and the negative temperature gradient: numerical analysis by using a nonlinear kinetic equation // Phys. Fluids. 1994. V. 6. P. 1379–1395.
13. **Владимиров В. С.** Обобщенные функции в математической физике. М.: Наука, 1976.
14. **Латышев А. В., Юшканов А. А.** Точные решения граничных задач для молекулярных газов / Отдел теорет. проблем РАН. М., 1998. Деп. в ВИНТИ 4.06.98, № 1725-В 98.
15. **Кейз К. М., Цвайфель П. Ф.** Линейная теория переноса. М.: Мир, 1972.
16. **Sone Y., Aoki K.** Negative thermophoresis: thermal stress slip flow around a spherical particle in a rarefied gas // Rarefied gas dynamics. N. Y.; L.: Acad. Press, 1981. Pt 1. P. 489–503.

*Поступила в редакцию 24/IV 2000 г.,
в окончательном варианте — 10/I 2001 г.*