

- Dynamics / Ed. Potter J. L. Progress in Astronautics and Aeronautics. V. 51. Princeton Univ., 1977, D.16-1-D.16-11.
6. Bird G. A. Aerodynamic properties of some simple bodies in the hypersonic transition regime. — AIAA Journal, 1966, v. 4, № 1, p. 55-67.

Москва

Поступила в редакцию
12.VI.1980

УДК 533.6.011.8

АПРОКСИМИРУЮЩЕЕ КИНЕТИЧЕСКОЕ УРАВНЕНИЕ ДЛЯ СЛАБО НЕРАВНОВЕСНЫХ СОСТОЯНИЙ ПОЛИАТОМНЫХ ГАЗОВ

СУЕТИН П. Е., ЧЕРМЯНИНОВ И. В., ЧЕРНЯК В. Г.

Успехи кинетической теории полиатомных газов связаны главным образом с вычислением коэффициентов переноса, выводом уравнений гидродинамического типа и описанием релаксационных процессов в неограниченном пространстве. В последние годы значительно возрос интерес к граничным проблемам динамики разреженных газов, в том числе полиатомных (кнудсеновский слой, внешние и внутренние течения при промежуточных значениях числа Кнудсена и т. д.). Теоретическое решение такого рода задач существенно упрощается, если вместо уравнения Больцмана используются аппроксимирующие кинетические уравнения.

В работе [1] для построения модельных кинетических уравнений развит метод максимизации энтропии. Основной недостаток полученного в [1] модельного уравнения состоит в том, что, не обладая достаточным числом свободных параметров, оно не дает правильного описания процесса релаксации некоторых важных макропараметров, например той составляющей теплового потока, которая обусловлена наличием внутренних степеней свободы молекул. Этот недостаток был исправлен в работе [2], в которой получено аппроксимирующее кинетическое уравнение для двухатомного газа (рассматриваются только вращательные степени свободы) с максвелловским законом межмолекулярного взаимодействия. В [2] приводится усреднение кинетического уравнения по всевозможным направлениям вектора собственного момента импульса молекул и по энергии вращательного движения.

В работе [3] аппроксимирующие кинетические уравнения для полиатомных газов строятся обобщенным методом Гросса — Джексона. В явном виде записано уравнение третьего приближения при разложении интеграла столкновений по собственным функциям и собственным значениям. Аналогичное уравнение получено в работе [4] методом равных моментов. При этом отличие от результатов [3] обусловлено тем, что в [4], во-первых, используются иные выражения для моментов интеграла столкновений и, во-вторых, допущена ошибка в выражении для равновесного значения средней внутренней энергии молекул.

Общий недостаток существующих аппроксимирующих уравнений в том, что они позволяют корректно учесть лишь один вид внутренней энергии молекул, например вращательной. Кроме того, некоторые из этих уравнений получены для максвелловских молекул и после усреднения не учитывают деталей межмолекулярного взаимодействия. Последнее обстоятельство может привести при решении конкретных задач к значительной ошибке, по крайней мере в количественном отношении.

Цель данной работы заключается в построении такого аппроксимирующего кинетического уравнения, которое, во-первых, корректно учитывало бы возможность возбуждения как вращательных, так и колебательных степеней свободы молекул и, во-вторых, было бы справедливо для любого закона межмолекулярных взаимодействий.

Состояние молекулярного газа будем описывать функцией распределения

$$f_{ij} \equiv f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}, E_i^{(r)}, E_j^{(v)}), \quad \text{где } t, \mathbf{r}, \mathbf{v} - \text{соответственно время, радиус-вектор, вектор}$$

скорости молекулы, а $E_i^{(r)}, E_j^{(v)}$ — энергии i -го вращательного и j -го колебательного уровней. Предполагается, что состояние газа близко к равновесному и, следовательно, функция распределения мало отличается от максвелловской

$$f_{ij} = P_i^{(r)} P_j^{(v)} f_0 (1 + h_{ij}), \quad f_0 = n_0 \left(\frac{m}{2\pi kT_0} \right)^{3/2} \exp \left(- \frac{mv^2}{2kT_0} \right) \quad (1)$$

$$P_{\beta}^{(\alpha)} = \exp\left(-\frac{E_{\beta}^{(\alpha)}}{kT_0}\right) \left[\sum_{\beta} \exp\left(-\frac{E^{(\alpha)}}{kT_0}\right) \right]^{-1}; \quad \alpha=r, v; \quad \beta=i, j$$

Здесь $P_{\beta}^{(\alpha)}$ – вероятность состояния $E_{\beta}^{(\alpha)}$, m – масса молекулы, n_0 и T_0 – равновесные значения числовой плотности и температуры газа.

Для дальнейшего анализа введем следующие моменты функции распределения:

$$n = \sum_{i,j} f_{ij} dv = n_0(1+v) \quad (2)$$

$$\mathbf{v}_0 = \frac{1}{n} \sum_{i,j} \int f_{ij} \mathbf{v} dv = \left(\frac{2kT_0}{m}\right)^{1/2} \mathbf{u} \quad (3)$$

$$E^{(t)} = \frac{1}{n} \sum_{i,j} \frac{m}{2} \int V^2 f_{ij} dv = \frac{3}{2} kT_0(1+\theta^{(t)}), \quad \mathbf{V} = \mathbf{v} - \mathbf{v}_0 \quad (4)$$

$$E^{(\alpha)} = \frac{1}{n} \sum_{i,j} \int E_{\beta}^{(\alpha)} f_{ij} dv = E_0^{(\alpha)}(1+\theta^{(\alpha)}), \quad \alpha=r, v; \quad \beta=i, j \quad (5)$$

$$P_{kl} = m \sum_{i,j} \int V_k V_l f_{ij} dv = p_0[(1+\theta^{(t)})\delta_{kl} + 2\pi_{kl}], \quad p_0 = n_0 kT_0 \quad (6)$$

$$\mathbf{q}^{(t)} = \frac{m}{2} \sum_{i,j} \int \mathbf{v} V^2 f_{ij} dv = p_0 \left(\frac{2kT_0}{m}\right)^{1/2} \mathbf{Q}^{(t)} \quad (7)$$

$$\mathbf{q}^{(\alpha)} = \sum_{i,j} \int E_{\beta}^{(\alpha)} \mathbf{v} f_{ij} dv = p_0 \left(\frac{2kT_0}{m}\right)^{1/2} \mathbf{Q}^{(\alpha)}, \quad \alpha=r, v; \quad \beta=i, j \quad (8)$$

Здесь n – числовая плотность газа, \mathbf{v}_0 – вектор макроскопической скорости; $E^{(t)}$, $E^{(r)}$, $E^{(v)}$ – средняя энергия поступательного, вращательного и колебательного движения молекул, P_{kl} – тензор напряжения, p_0 – давление газа; $\mathbf{q}^{(t)}$, $\mathbf{q}^{(r)}$, $\mathbf{q}^{(v)}$ – векторы тепловых потоков, обусловленных поступательным, вращательным и колебательным движением молекул.

Безразмерные величины в выражениях (2)–(8) характеризуют относительное отклонение макроскопических параметров от их равновесных значений и определяются через функцию возмущения

$$\mathbf{A} = \pi^{-3/2} \sum_{i,j} P_i^{(r)} P_j^{(v)} \int \exp(-c^2) \mathbf{V} h_{ij} dc \quad (9)$$

$$\mathbf{A} = (A_m) = (v, \mathbf{u}, \theta^{(t)}, \theta^{(r)}, \theta^{(v)}, \pi_{kl}, \mathbf{Q}^{(t)}, \mathbf{Q}^{(r)}, \mathbf{Q}^{(v)})$$

$$\mathbf{B} = (B_m), \quad B_1 = 1, \quad B_2 = c, \quad B_3 = 2/3c^2 - 1$$

$$B_4 = \varepsilon_i^{(r)} (\langle \varepsilon^{(r)} \rangle)^{-1} - 1, \quad B_5 = \varepsilon_j^{(v)} (\langle \varepsilon^{(v)} \rangle)^{-1} - 1, \quad B_6 = c_k c_l - c^2 \delta_{kl} / 3$$

$$B_7 = c(c^2 - 5/2), \quad B_8 = c(\varepsilon_i^{(r)} - \langle \varepsilon^{(r)} \rangle), \quad B_9 = c(\varepsilon_j^{(v)} - \langle \varepsilon^{(v)} \rangle)$$

$$c = (m/2kT_0)^{1/2} v, \quad \varepsilon_i^{(r)} = E_i^{(r)} / kT_0, \quad \langle \varepsilon^{(r)} \rangle = E_0^{(r)} / kT_0$$

Здесь угловые скобки означают усреднение с бoльцмановским множителем $P_i^{(r)} P_j^{(v)}$.

В соответствии с приближением слабых возмущений кинетическое уравнение линеаризуется и записывается в виде

$$(\partial/\partial t + \mathbf{v}\nabla) h_{ij} = L h_{ij} \quad (10)$$

причем интеграл столкновений выбирается в форме [5]

$$Lh_{ij} = \sum_{i_i' i_i''} \sum_{j_j' j_j''} P_{i_i}^{(r)} P_{j_j}^{(v)} \int \int_{\omega} [h_{i_i' j_j'} + h_{i_i'' j_j''} - h_{i_i j} - h_{i_i j_1}] |v - v_1| \sigma_{i_i j_j i_i' j_j'}^{i_i' j_j' i_i'' j_j''} d\omega dv_1 \quad (11)$$

Здесь $\sigma_{i_i j_j i_i' j_j'}^{i_i' j_j' i_i'' j_j''}$ — дифференциальное сечение рассеяния с переходами сталкивающихся молекул по вращательному спектру с уровней i, i_1 на уровни i', i_1' , а по колебательному спектру — с уровней j, j_1 на уровни j', j_1' ; $d\omega$ — телесный угол рассеяния.

Процедура построения аппроксимирующих уравнений предполагает, что интеграл столкновений (11) может быть записан в виде

$$Lh_{ij} = -\gamma h_{ij} + \sum_{k=0}^{\infty} a_k \Psi_k(c, e_i^{(r)}, e_j^{(v)}) \quad (12)$$

Здесь $\{\Psi_k\}$ — полный набор ортонормированных функций, представляющих собой произведения неприводимых тензорных полиномов Эрмита и специальных полиномов для каждого вида внутренней энергии [6]; параметр γ имеет смысл частоты столкновений между молекулами и предполагается не зависящим от молекулярных скоростей.

Метод последовательных приближений заключается в ограничении ряда в правой части выражения (12); при этом в сумме берется N членов, а соответствующий оператор в левой части обозначается $L^{(N)}$. Коэффициенты разложения a_k определяются из требования ортогональности невязки $R^{(N)} = Lh_{ij} - L^{(N)}h_{ij}$ к каждой из базовых функций Ψ_k ($k \leq N$), т. е.

$$(R^{(N)}, \Psi_k) = 0; \quad (f, g) = \sum_{i,j} P_i^{(r)} P_j^{(v)} \int \exp(-c^2) fg dc \quad (13)$$

Здесь (f, g) — скалярное произведение функций f и g . Основная трудность такой процедуры заключается в вычислении моментов от полного интеграла столкновений. С этой целью функция возмущения записывается в виде

$$h_{ij} = \sum_{k=0}^N b_k \Psi_k \quad (14)$$

Коэффициенты разложения b_k выражаются через моменты функции распределения. Используя выражение (14), легко установить связь между моментами полного интеграла столкновений и моментами функции распределения.

В данной работе строится аппроксимирующее уравнение третьего порядка, которое дает правильное описание процессов релаксации всех имеющих физический смысл моментов функции распределения (2) — (8). Для этого полагается

$$L^{(3)}h_{ij} = -\gamma h_{ij} + a_0 + a_k c_k + a^{(r)}(e_i^{(r)} - \langle e^{(r)} \rangle) + a^{(v)}(e_j^{(v)} - \langle e^{(v)} \rangle) + a_{ik} c_i c_k + a_k^{(r)} c_k (e_i^{(r)} - \langle e^{(r)} \rangle) + a_k^{(v)} c_k (e_j^{(v)} - \langle e^{(v)} \rangle) + a_k^{(t)} c_k (c^2 - 5/2) \quad (15)$$

Неизвестные коэффициенты в выражении (15) определяются из условий ортогональности (13) при $\Psi_k = B_k(c \rightarrow c_i)$. Моменты полного интеграла столкновений (11) вычислены в работе [7] для функции распределения 21-моментного приближения.

В результате аппроксимирующий интеграл столкновений третьего порядка имеет вид

$$L^{(3)}h_{ij} = -\gamma h_{ij} + \gamma v + 2\gamma u c_k + [(\gamma - v_{rr} - v_{rv} - v_{vr} - v_{vv}) \theta^{(t)} - 2/3 (v_{rv} + v_{vv}) \langle e^{(r)} \rangle \theta^{(r)} - 2/3 (v_{rr} + v_{vr}) \langle e^{(v)} \rangle \theta^{(v)}] (c^2 - 5/2) + (k/c_V^{(r)}) [\langle e^{(r)} \rangle \theta^{(r)} (\gamma - v_{rr}) - v_{rv} \langle e^{(v)} \rangle \theta^{(v)}] \times \\ \times (e_i^{(r)} - \langle e^{(r)} \rangle) + (k/c_V^{(v)}) [(\gamma - v_{vv}) \langle e^{(v)} \rangle \theta^{(v)} - v_{vr} \langle e^{(r)} \rangle \theta^{(r)}] (e_j^{(v)} - \langle e^{(v)} \rangle) + 2(\gamma - \tau_n^{-1}) c_k c_i \pi_{kl} + 4/5 [v^{(1)} Q_k^{(t)} + v^{(2)} Q_k^{(r)} + v^{(3)} Q_k^{(v)}] c_k (c^2 - 5/2) + \quad (16)$$

$$+ 2(k/c_V^{(r)}) [v^{(4)} Q_k^{(r)} + v^{(5)} Q_k^{(r)} - v^{(6)} Q_k^{(r)}] c_k (\varepsilon_i^{(r)} - \langle \varepsilon^{(r)} \rangle) + \\ + 2(k/c_V^{(v)}) [v^{(7)} Q_k^{(v)} + v^{(8)} Q_k^{(v)} - v^{(9)} Q_k^{(v)}] c_k (\varepsilon_j^{(v)} - \langle \varepsilon^{(v)} \rangle)$$

где использованы следующие обозначения:

$$v_{rr} = \frac{2}{3} \frac{c_V - c_V^{(v)}}{k\tau_r} + \frac{1}{3} \frac{c_V^{(r)} c_V^{(v)}}{k^2 \tau_{rv}}, \quad v_{rv} = \frac{2}{3} \frac{c_V^{(r)}}{k\tau_r} + \frac{1}{3} \frac{c_V^{(r)} (c_V - c_V^{(r)})}{k^2 \tau_{rv}} \quad (17)$$

$$v_{vr} = \frac{2}{3} \frac{c_V^{(v)}}{k\tau_v} + \frac{1}{3} \frac{c_V^{(v)} (c_V - c_V^{(v)})}{k^2 \tau_{rv}}, \quad v_{vv} = \frac{2}{3} \frac{c_V - c_V^{(r)}}{k\tau_v} + \frac{1}{3} \frac{c_V^{(r)} c_V^{(v)}}{k^2 \tau_{rv}}$$

$$v^{(4)} = \gamma - \frac{2}{3} \left[\frac{1}{\tau_\eta} + \frac{5}{6} \frac{c_V^{(r)}}{k\tau_r} + \frac{5}{6} \frac{c_V^{(v)}}{k\tau_v} + \frac{5}{6} \frac{c_V^{(r)} c_V^{(v)}}{k^2 \tau_{rv}} \right], \quad \tau_\eta = \frac{\eta}{p_0}$$

$$v^{(2)} = \frac{5}{6} \left(\frac{1}{\tau_r} + \frac{1}{2} \frac{c_V^{(v)}}{k\tau_{rv}} \right), \quad v^{(3)} = \frac{5}{6} \left(\frac{1}{\tau_v} + \frac{1}{2} \frac{c_V^{(r)}}{k\tau_{rv}} \right)$$

$$v^{(4)} = \gamma - \frac{1}{\tau_{Dr}} - \frac{1}{2\tau_r}, \quad v^{(5)} = \frac{1}{3} \frac{c_V^{(r)}}{k} \left(\frac{1}{\tau_r} + \frac{1}{2} \frac{c_V^{(v)}}{k\tau_{rv}} \right)$$

$$v^{(6)} = \frac{c_V^{(r)}}{k} \left(\frac{1}{\tau_{Drv}} + \frac{1}{4\tau_{rv}} \right), \quad v^{(7)} = \gamma - \frac{1}{\tau_{Dv}} - \frac{1}{2\tau_v}$$

$$v^{(8)} = \frac{1}{3} \frac{c_V^{(v)}}{k} \left(\frac{1}{\tau_v} + \frac{c_V^{(r)}}{2k\tau_{rv}} \right), \quad v^{(9)} = \frac{c_V^{(v)}}{k} \left(\frac{1}{\tau_{Drv}} + \frac{1}{4\tau_{rv}} \right)$$

$$c_V = 3/2 k + c_V^{(r)} + c_V^{(v)}$$

$$c_V^{(\alpha)} = (\partial E_0^{(\alpha)} / \partial T)_V = k (\langle \varepsilon^{(\alpha)2} \rangle - \langle \varepsilon^{(\alpha)} \rangle^2), \quad \alpha = r, v$$

Здесь η — коэффициент динамической вязкости газа; c_V — теплоемкость газа при постоянном объеме; $c_V^{(r)}$, $c_V^{(v)}$ — вклады в теплоемкость вращательных и колебательных степеней свободы молекул; времена релаксации τ_r , τ_v , τ_{rv} , τ_η , τ_{Dr} , τ_{Dv} , τ_{Drv} при заданном потенциале межмолекулярного взаимодействия могут быть вычислены по формулам, приведенным в [7] (в этой же работе подробно обсуждается их физический смысл и связь с коэффициентами переноса).

Аппроксимирующий интеграл столкновений (16), как и в [4] обладает одним дефектом, а именно: из выражения (16) следует, что упругие столкновения между молекулами приводят к изменению чисел заполнения уровней внутренней энергии на величину

$$\Delta n_{ij} = \pi^{-3/2} \int (L^{(3)} h_{ij}) \exp(-c^2) dc = \gamma_0 \left[v - v_{ij} + \frac{k}{c_V^{(r)}} \langle \varepsilon^{(r)} \rangle \theta^{(r)} (\varepsilon_i^{(r)} - \langle \varepsilon^{(r)} \rangle) + \right. \\ \left. + \frac{k}{c_V^{(v)}} \langle \varepsilon^{(v)} \rangle \theta^{(v)} (\varepsilon_j^{(v)} - \langle \varepsilon^{(v)} \rangle) \right] \\ v_{ij} = \pi^{-3/2} \int h_{ij} \exp(-c^2) dc \quad (18)$$

Здесь v_{ij} — относительное отклонение числовой плотности молекул в состоянии i, j от равновесного значения, γ_0 — составляющая параметра γ , обусловленная только упругими столкновениями молекул. Чтобы исключить этот физически абсурдный результат, достаточно аппроксимирующий интеграл столкновений представить в следующем окончательном виде [4]:

$$L_1^{(3)} h_{ij} = L^{(3)} h_{ij} - \Delta n_{ij} \quad (19)$$

при этом добавка Δn_{ij} не изменяет моменты интеграла столкновений.

Параметр γ может быть выбран произвольно, например по аналогии с [2]

$$\gamma = \tau_{\eta}^{-1} = p_0 \eta^{-1}, \quad \gamma_0 = \gamma(1 - Z_r^{-1} - Z_v^{-1}), \quad Z_{\alpha} = 4\tau_{\alpha}(\pi\tau_{\eta})^{-1}, \quad \alpha = r, v$$

Здесь Z_r и Z_v — вращательное и колебательное числа, т. е. числа столкновений, необходимых для установления равновесия по вращательным и колебательным степеням свободы [7].

К недостаткам всех аппроксимирующих уравнений высших порядков часто относят невозможность доказательства на их основе H -теоремы Больцмана. Однако это возражение снимается в случае слабо неравновесных состояний. В частности, для аппроксимирующих кинетических уравнений любого порядка, обсуждаемых в данной работе, это теорема доказывается аналогично [3].

Кинетическое уравнение с интегралом столкновений (16) позволяет получить точно такую же систему моментных уравнений, которая следует из полного уравнения Больцмана с моментами интеграла столкновений, рассчитанными в 21-моментном приближении для функции распределения [7]. Следует также отметить, что индексы (r) и (v) в выражении (16) носят формальный характер. Поэтому кинетическое уравнение, соответствующее (16), справедливо для произвольных двух видов внутреннего движения молекул, в том числе для двух различных вращательных спектров или двух внутримолекулярных колебаний с разными частотами.

Если при межмолекулярных столкновениях возбуждается лишь один вид внутренней энергии ($\tau_r \ll \tau_v, \tau_{rv}, \tau_{Dr}, \tau_{Dv}$), то из (16) следует аппроксимирующий интеграл столкновений, полученный в [3]. В том случае, когда неупругие столкновения отсутствуют ($\tau_{\eta} \ll \tau_r, \tau_v, \tau_{rv}, \tau_{Dr}, \tau_{Dv}, \tau_{Drs}$), выражение (16) формально совпадает с S -моделью для одноатомного газа [8].

Авторы благодарят М. Я. Алиевского за полезные консультации.

ЛИТЕРАТУРА

1. Holway L. H. New statistical models for kinetic theory: methods of construction.— Phys. Fluids, 1966, v. 9, № 9, p. 1658–1673. (Рус. перев.: Холуэй Л. Г. Новые статистические модели для кинетической теории и методы их построения. Механика. Период. сб. перев. иностр. ст., 1967, вып. 6, с. 46–72).
2. Рыков В. А. Модельное кинетическое уравнение для газа с вращательными степенями свободы.— Изв. АН СССР. МЖГ, 1975, № 6, с. 107–115.
3. Hanson F. B., Morse T. F. Kinetic models for a gas with internal structure.— Phys. Fluids, 1967, v. 10, № 2, p. 345–353.
4. McCormack F. J. Construction of linearized kinetic models for gaseous mixtures and molecular gases.— Phys. Fluids, 1973, v. 16, № 12, p. 2095–2105.
5. Wang-Chang C. S., Uhlenbeck G. E., de Boer J. The heat conductivity and viscosity of polyatomic gases.— In: Studies in Statistical Mechanics. Amsterdam: North-Holland Publ. Co., v. 2, p. 241–268.
6. Waldmann L., Trübenbacher E. Formale Kinetische Theorie von Gas, Gemischen aus Anregbaren Molekülen.— Z. Naturforsch., 1962, B. 17a, № 5, S. 363–376.
7. Алиевский М. Я. Релаксация, распространение звука и процессы переноса в молекулярных газах.— Изв. АН СССР. МЖГ, 1970, № 5, с. 53–67.
8. Шахов Е. М. О приближенных кинетических уравнениях в теории разреженных газов.— Изв. АН СССР. МЖГ, 1968, № 1, с. 156–161.

Свердловск

Поступила в редакцию
25.VI.1980

УДК 533.951

СТРУКТУРА СЛАБОЙ БЕССТОЛКНОВИТЕЛЬНОЙ УДАРНОЙ ВОЛНЫ, ОБУСЛОВЛЕННАЯ ЭЛЕКТРОННЫМИ ЦИКЛОТРОННЫМИ ВОЛНАМИ

РУДЕРМАН М. С.

В настоящей работе аналитически исследуется структура слабой бесстолкновительной ударной волны, распространяющейся в замагниченной плазме поперек магнитного поля. Диссипация обеспечивается неустойчивостью, возникающей на электронных циклотронных колебаниях. Подобная задача рассматривалась в [1], где в отличие от обычной классической постановки задавалось значение производной магнитного поля в некоторой точке перед фронтом ударной волны вместо задания граничных условий на бесконечности.