МЕХАНИКА
ЖИДКОСТИ И ГАЗА
№ 2 • 1986

УДК 533.6.011.8

КИНЕТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ БРОУНОВСКОГО ДВИЖЕНИЯ НАГРЕТЫХ ЧАСТИЦ В РАЗРЕЖЕННОМ ГАЗЕ

БОРИС А. Ю., ГАЛКИН В. С.

Рассматривается поступательное и вращательное броуновское движение сферической частицы в разреженном газе. Считается, что радиус частицы много меньше длины свободного пробега молекул в газе. Проведено обобщение интеграла столкновений частиц с молекулами газа на случай произвольного закона взаимодействия молекул с поверхностью частицы, что позволяет рассматривать ситуации, когда отсутствует термодинамическое равновесие между частицами и газом, в частности температура частицы отличается от температуры газа. Разложением по малому параметру – отношению масс молекулы и частицы – кинетическое уравнение типа Больцмана сводится к уравнению Фоккера – Планка для функции распределения частиц. Коэффициенты уравнения вычисляются в явном виде для случая диффузного взаимодействия молекул с поверхностью частицы. Получена зависимость коэффициентов диффузии от отношения температур частицы и газа.

1. Уравнение Фоккера – Планка для функции распределения поступательно движущихся броуновских частиц $f_p=f_p(\mathbf{x}, t, \xi_p)$ имеет вид [1]

$$\frac{df_p}{dt}=\frac{\partial f_p}{\partial t}+\xi_p\frac{\partial f_p}{\partial \mathbf{x}}=\frac{\partial}{\partial \xi_p}\left(\alpha f_p+D\frac{\partial f_p}{\partial \xi_p}\right) \tag{1.1}$$

Здесь ξ_p – скорость частицы, m_p – ее масса, $\alpha=-\mathbf{F}/m_p$, $\mathbf{F}$ – сила, действующая на частицу. Если эта сила является силой сопротивления, то $-\mathbf{F}/m_p=\gamma\xi_p$. В случае, когда частица находится в состоянии термодинамического равновесия с газом, коэффициент диффузии в пространстве скоростей $D=\gamma kT/m_p$, где T – температура газа.

В общем случае уравнение (1.1) и входящие в него коэффициенты могут быть получены из кинетического уравнения с учетом флуктуаций [1]. Однако в свободномолекулярном пределе (длина свободного пробега молекул много больше радиуса частиц) уравнение (1.1) можно получить, используя чисто кинетическое описание. Это связано с тем, что только одна из каждой пары сталкивающихся в газе молекул может попасть на частицу и, следовательно, все падающие на частицу молекулы движутся статистически независимо. Поэтому многочастичные функции распределения падающих на частицу молекул являются произведениями одночастичных и движение частиц можно описать с использованием только одночастичной функции распределения при помощи уравнения типа Больцмана для смеси тяжелых частиц и молекул.

В работах [2, 3] уравнение (1.1) было получено разложением интеграла столкновений уравнения Больцмана для смеси тяжелых частиц и молекул. Считалось, что молекулы и частицы являются упругими сферами. Было получено, что в коэффициент α входит выражение для силы, действующей на зеркально отражающую частицу в свободномолекулярном потоке. В [2] используется максвелловская функция распределения молекул газа и коэффициент α включает только силу сопротивления. В [3] используется навье-стоксовская функция распределения, поэтому в α входит также термофоретическая сила. Коэффициент D совпадает с получаемым из термодинамических соображений.

Принятая в [2, 3] модель упругого отражения молекул от поверхности частицы не позволяет рассматривать ситуации, когда отсутствует термодинамическое равновесие между частицей и газом (например, различаются температуры частицы и газа). Поэтому представляет интерес обобщение результатов [2, 3] для более реалистических законов взаимодействия молекул с частицами, в частности для диффузного, позволяющего учитывать влияние неравновесности как на поступательное, так и на вращательное броуновское движение частицы.

2. Будем рассматривать тяжелые частицы и газ как двухкомпонентную смесь и выпишем уравнение $dF_p/dt=J$ для функции распределения частиц по поступательным ξ_p и угловым ω_p скоростям $F_p=F_p(\mathbf{x}, t, \xi_p, \omega_p)$, пренебрегая, как обычно, столкновениями частиц друг с другом (J — интеграл столкновений частиц с молекулами). Поскольку взаимодействие молекул с поверхностью частицы в общем случае носит случайный характер, т. е. скорости частицы и молекулы после столкновений не определяются однозначно их скоростями до столкновения, и задана только плотность вероятности $P(\mathbf{g}, \mathbf{g}')$ того, что молекула, падающая с относительной скоростью $\mathbf{g}$, будет испущена с относительной скоростью $\mathbf{g}'$, то уравнение Больцмана стандартного вида в данной ситуации неприменимо.

Проведем вычисление разности прибыли и убыли числа частиц на единицу времени и в единице физического объема, т. е. величины $\Delta_+ - \Delta_- = J d\xi_p d\omega_p$. Для скоростей молекул после и до столкновения с элементом поверхности сферы $d\mathrm{S}$ из законов сохранения импульса и момента количества движения (закон сохранения энергии в общем случае не выполняется) следуют формулы:

$$\begin{gathered}\xi'=\mathbf{v}+\mathbf{g}'-\varepsilon\Delta\mathbf{g}+(1-\varepsilon)\delta\mathbf{n}\times(\mathbf{n}\times\Delta\mathbf{g}),\quad \Delta\mathbf{g}=\mathbf{g}'-\mathbf{g}\\ \xi_p'=\xi_p-\varepsilon\Delta\mathbf{g}-\varepsilon\delta\mathbf{n}\times(\mathbf{n}\times\Delta\mathbf{g}),\quad \varepsilon=m(m_p+m)^{-1}\\ \omega_p'=\omega_p-\delta R^{-1}(\mathbf{n}\times\Delta\mathbf{g}),\quad \delta=\varepsilon(\sigma+\varepsilon)^{-1},\quad \sigma=I(m_pR^2)^{-1}\\ \mathbf{g}=\xi-\mathbf{v},\quad \mathbf{g}'=\xi'-\mathbf{v}',\quad \mathbf{v}=\xi_p-R(\mathbf{n}\times\omega_p)\end{gathered}\tag{2.1}$$

Здесь m — масса молекулы, ξ', ξ — абсолютные скорости молекул после и до столкновения, $\mathbf{g}'$, $\mathbf{g}$ — соответствующие скорости относительно элемента поверхности $d\mathrm{S}$, $\mathbf{n}$ — внешняя нормаль к нему, R, I — радиус и момент инерции частицы.

Число столкновений молекул со скоростями из элемента $d\xi$ с частицами, имеющими скорости в элементе $d\xi_p d\omega_p$, равно

$$|\mathbf{ng}|f(\mathbf{x}, t, \xi)d\xi d\mathrm{S} F_p(\mathbf{x}, t, \xi_p, \omega_p)d\xi_p d\omega_p$$

Здесь f — функция распределения молекул. В дальнейшем для краткости аргументы $\mathbf{x}$, t в функциях распределения опускаем.

Вероятность того, что молекулы после отражения от $d\mathrm{S}$ приобретут относительные скорости из элемента $d\mathbf{g}'$, равна $P(\mathbf{g}, \mathbf{g}')d\mathbf{g}'$, где P отнесена к потоку числа налетающих молекул, т. е. полная вероятность испускания молекулы (интеграл от $P(\mathbf{g}, \mathbf{g}')$ по области $\mathbf{ng}'>0$) равна единице. В результате получаем

$$\Delta_- = \int\limits_{\mathbf{ng}<0}\int\limits_{\mathbf{ng}'>0}\int\limits_{S} |\mathbf{ng}|f(\xi)P(\mathbf{g},\mathbf{g}')F_p(\xi_p, \omega_p)d\xi\, d\mathbf{g}'\, d\xi_p\, d\omega_p\, d\mathrm{S}$$

Аналогично вычисляется число столкновений, переводящих скорости ξ', ξ_p', ω_p' в $\mathbf{g}$, ξ_p, ω_p. Имеем

$$\Delta_+ = \int\limits_{\mathbf{ng}'<0}\int\limits_{\mathbf{ng}>0}\int\limits_{S} |\mathbf{ng}'|f(\xi')P(\mathbf{g}',\mathbf{g})F_p(\xi_p', \omega_p')d\xi'\, d\mathbf{g}\, d\xi_p'\, d\omega_p'\, d\mathrm{S}$$

Используя (2.1), можно показать, что $d\xi d\mathbf{g}' d\xi_p d\omega_p = d\xi' d\mathbf{g} d\xi_p' d\omega_p' = d\mathbf{g} d\mathbf{g}' d\xi_p d\omega_p$. После сокращения на $d\xi_p d\omega_p$ получаем

$$\begin{aligned}J=\int\{&H(-\mathbf{ng}')H(\mathbf{ng})\,|\mathbf{ng}'|\,f(\mathbf{g}'+\mathbf{v})P(\mathbf{g}',\mathbf{g})F_p(\xi_p',\omega_p')-\\ &-H(-\mathbf{ng})H(\mathbf{ng}')\,|\mathbf{ng}|\,f(\mathbf{g}+\mathbf{v})P(\mathbf{g},\mathbf{g}')F_p(\xi_p,\omega_p)\}\,d\mathbf{g}\,d\mathbf{g}'\,d\mathrm{S}.\end{aligned}$$

Здесь интегрирование проводится по полным скоростным пространствам, функция $H(x)$ равна 1 для $x>0$ и 0 для $x<0$. Подставляя вместо ξ', ξ_p', ω_p' выражения (2.1), переобозначая переменные $\mathbf{g}'$ на $\mathbf{g}$ и $\mathbf{g}$ на $\mathbf{g}'$ в первом члене J, окончательно найдем

$$J=\int[f(\eta+\Delta_\eta)F_p(\xi_p+\Delta_\xi,\omega_p+\Delta_\omega)-f(\eta)F_p(\xi_p,\omega_p)]d\Omega$$

$$d\Omega=H(-\mathbf{ng})H(\mathbf{ng}')|\mathbf{ng}|P(\mathbf{g},\mathbf{g}')d\mathbf{g}d\mathbf{g}'d\mathbf{S}$$

$$\eta=\mathbf{g}+\mathbf{v},\qquad \Delta_\eta=\varepsilon\Delta\mathbf{g}-(1-\varepsilon)\delta\mathbf{n}\times(\mathbf{n}\times\Delta\mathbf{g})$$

$$\Delta_\xi=\varepsilon\Delta\mathbf{g}+\varepsilon\delta\mathbf{n}\times(\mathbf{n}\times\Delta\mathbf{g}),\qquad \Delta_\omega=R^{-1}\delta(\mathbf{n}\times\Delta\mathbf{g})\tag{2.2}$$

3. Проведем разложение выражения в квадратных скобках формулы (2.2) в ряд по $\varepsilon\ll1$. Члены нулевого порядка сокращаются, члены первого порядка можно записать так

$$\varepsilon\left\{F_p\frac{\partial f}{\partial\eta_i}\Delta g_i+f\frac{\partial F_p}{\partial\xi_{pi}}\Delta g_i+\frac{f}{\sigma R}\frac{\partial F_p}{\partial\omega_{pi}}(\mathbf{n}\times\Delta\mathbf{g})_i-\frac{F_p}{\sigma}\frac{\partial f}{\partial\eta_i}[\mathbf{n}\times(\mathbf{n}\times\Delta\mathbf{g})]_i\right\}\tag{3.1}$$

Здесь $f=f(\eta)$, $F_p=F_p(\xi_p,\omega_p)$. Объединяя первый член в (3.1) со вторым, а третий с четвертым, получаем (3.2). Аналогично преобразуем и следующие члены ряда (3.3):

$$\varepsilon\frac{\partial}{\partial\xi_{pi}}(\Delta g_i fF_p)+\frac{\varepsilon}{\sigma R}\frac{\partial}{\partial\omega_{pi}}[(\mathbf{n}\times\Delta\mathbf{g})_i fF_p]\tag{3.2}$$

$$\frac{\varepsilon^2}{2}\left\{\frac{\partial^2}{\partial\xi_{pi}\partial\xi_{pj}}[\Delta g_i\Delta g_j fF_p]+\frac{1}{R^2\sigma^2}\frac{\partial^2}{\partial\omega_{pi}\partial\omega_{pj}}[(\mathbf{n}\times\Delta\mathbf{g})_i(\mathbf{n}\times\Delta\mathbf{g})_j fF_p]+\right.$$
$$\left.+\frac{2}{\sigma R}\frac{\partial^2}{\partial\xi_{pi}\partial\omega_{pj}}[\Delta g_i(\mathbf{n}\times\Delta\mathbf{g})_j fF_p]\right\}+\ldots\tag{3.3}$$

Разложение (3.2), (3.3) можно упростить. Как обычно, температуры «легкого» и «тяжелого» газов полагаем равными по порядку величины. Тогда $\xi_p\sim g\sqrt{\varepsilon}\ll1$, $R\omega_p\sim g\sqrt{\varepsilon}\ll1$. Поэтому

$$f(\mathbf{g}+\mathbf{v})=f(\mathbf{g})+[\xi_{pi}-R(\mathbf{n}\times\omega_p)_i]\partial f(\mathbf{g})/\partial g_i+\ldots\tag{3.4}$$

С учетом (3.4) после несложных преобразований главные члены разложения J принимают вид

$$J=\frac{\partial}{\partial\xi_{pi}}\left(-\frac{F_i}{m_p}F_p\right)+\frac{\partial}{\partial\omega_{pi}}\left(-\frac{M_i}{I}F_p\right)+$$
$$+\frac{\varepsilon}{2m_p}\left\{\frac{\partial^2}{\partial\xi_{pi}\partial\xi_{pj}}\langle\Delta g_i\Delta g_j f\rangle F_p+\right.$$
$$+\frac{1}{R^2\sigma^2}\frac{\partial^2}{\partial\omega_{pi}\partial\omega_{pj}}\langle(\mathbf{n}\times\Delta\mathbf{g})_i(\mathbf{n}\times\Delta\mathbf{g})_j f\rangle F_p+$$
$$\left.+\frac{2}{R\sigma}\frac{\partial^2}{\partial\xi_{pi}\partial\omega_{pj}}\langle\Delta g_i(\mathbf{n}\times\Delta\mathbf{g})_j f\rangle F_p\right\}$$

$$-F_i=\langle\Delta g_i f\rangle+\left\langle\Delta g_i\frac{\partial f}{\partial g_j}\right\rangle\xi_{pj}+R\left\langle\Delta g_i\left(\mathbf{n}\times\frac{\partial f}{\partial\mathbf{g}}\right)_j\right\rangle\omega_j$$

$$-\frac{M_i}{I}=\frac{1}{R\sigma m_p}\left\{\langle(\mathbf{n}\times\Delta\mathbf{g})_i f\rangle+\right.$$
$$\left.+R\left\langle(\mathbf{n}\times\Delta\mathbf{g})_i\left(\mathbf{n}\times\frac{\partial f}{\partial\mathbf{g}}\right)_j\right\rangle\omega_j+\left\langle(\mathbf{n}\times\Delta\mathbf{g})_i\frac{\partial f}{\partial g_j}\right\rangle\xi_{pj}\right\}$$

$$f=f(\mathbf{g}),\quad F_p=F_p(\xi_p,\ \omega_p)$$

$$\langle A\rangle=m\int AH(-\mathbf{ng})H(\mathbf{ng}')\,|\mathbf{ng}|P(\mathbf{g},\mathbf{g}')\,d\mathbf{g}\,d\mathbf{g}'\,d\mathbf{S}$$

Коэффициенты вида $\langle A\rangle$ не зависят от ξ_p, ω_p. Связи между коэффициентами разложения и компонентами силы F_i и момента M_i следуют из сравнения полученных выражений с общими определениями силы и момента, действующими на выпуклое тело в разреженном газе [4, 5]. В слабо неравновесном газе можно линеаризовать $f(\mathbf{g})\approx f_0(\mathbf{g})+\delta f$ относительно абсолютной максвелловской функции

$$f_0(\mathbf{g})=n_0(h\pi)^{-3/2}\exp(-g^2/h),\qquad h=2kT/m \tag{3.5}$$

В главном приближении во все входящие в (3.4) интегралы подставляем $f(\mathbf{g})=f_0(\mathbf{g})$, за исключением первых членов в F_i, M_i, которые примут вид $\langle\Delta g_i\delta f\rangle$, $\langle(\mathbf{n}\times\Delta\mathbf{g})_i\delta f\rangle$, так как они равны нулю на f_0. Если температура газа неоднородна, то $\langle\Delta\mathbf{g}\delta f\rangle=-\mathbf{F}^T$, где $\mathbf{F}^T$ — термофоретическая сила [3].

В дальнейшем полагаем $f=f_0$. Из рассмотрения слагаемых выражения (3.4) следует, что они одного порядка величины $O(\varepsilon)$, так как $\partial/\partial\xi_p\sim\sim R^{-1}\partial/\partial\boldsymbol{\omega}_p\sim\varepsilon^{-1/2}$. Порядок отброшенных членов равен $O(\varepsilon^{3/2})$.

4. Рассмотрим широко применяющийся закон диффузного отражения молекул газа от поверхности тела, когда

$$P(\mathbf{g},\mathbf{g}')=\frac{2}{\pi}\left(\frac{m}{2kT_p}\right)^2|\mathbf{ng}'|\exp\left(-\frac{mg'^2}{2kT_p}\right),\quad \mathbf{ng}'>0 \tag{4.1}$$

Для закона отражения (4.1) и максвелловской функции распределения налетающих молекул (3.5) с учетом сферической симметрии задачи окончательно найдем

$$\frac{dF_p}{dt}=\frac{\partial}{\partial\xi_{pi}}\left(\gamma_\xi\xi_{pi}F_p+D_\xi\frac{\partial F_p}{\partial\xi_{pi}}\right)+\frac{\partial}{\partial\omega_{pi}}\left(\gamma_\omega\omega_{pi}F_p+D_\omega\frac{\partial F_p}{\partial\omega_{pi}}\right) \tag{4.2}$$

Остальные слагаемые, входившие в выражение (3.3) для J равны нулю при сделанных предположениях. Коэффициенты уравнения (4.2) даются следующими формулами:

$$\gamma_\xi={}^8/_3mn_0R^2\sqrt{\pi h}\,(1+{}^1/_8\sqrt{\tau}),\quad h=2kT/m,\quad \tau=T_p/T$$

$$D_\xi={}^2/_3m^2n_0R^2\sqrt{\pi}h^{3/2}(1+{}^1/_4\pi\sqrt{\tau}+\tau)\,m_p^{-2}$$

$$\gamma_\omega={}^4/_3mn_0R^4\sqrt{\pi h}\,I_p^{-1},\quad D_\omega={}^1/_3m^2n_0R^4\sqrt{\pi}h^{3/2}(1+\tau)\,I_p^{-2}$$

Полученные значения γ_ξ, γ_ω совпадают с теми, которые следуют из общих выражений [4, 5] для силы и момента, действующих на диффузно отражающую сферу в свободномолекулярном потоке при малых поступательной и вращательной скоростях. Коэффициенты диффузии в пространствах поступательных и угловых скоростей D_ξ, D_ω при $T_p=T$ совпадают с известными «равновесными» значениями и растут с увеличением T_p/T.

Интегрируя (4.2) по всем ω_p, получим уравнение Фоккера — Планка (1.1) для функции распределения частиц по поступательным скоростям $f_p(\xi_p)$

$$f_p(\xi_p)=\int F_p(\xi_p,\ \omega_p)\,d\boldsymbol{\omega}_p\qquad\left(\int\frac{\partial F_p}{\partial\omega_p}d\omega_p=0\right)$$

Из уравнения (4.2) для стационарного пространственно однородного случая получим «равновесную» функцию распределения

$$F_p^{(0)}=n_p\left(\frac{m_p}{2\pi kT_\xi}\right)^{3/2}\exp\left(-\frac{m_p\xi_p^2}{2kT_\xi}\right)\left(\frac{I_p}{2\pi kT_\omega}\right)^{3/2}\exp\left(-\frac{I_p\omega_p^2}{2kT_\omega}\right)$$

Эффективные температуры поступательного (T_ξ) и вращательного (T_ω) движений различны при $T_p \neq T$ и увеличиваются с ростом $\tau = T_p/T$. Также увеличиваются среднеквадратичные скорости $\langle \xi_p^2 \rangle = 3kT_\xi/m_p$, $\langle \omega_p^2 \rangle = 3kT_\omega/I_p$

$$T_\xi = {}^1\!/_2 T\,(1 + {}^1\!/_4 \pi \sqrt{\tau} + \tau)\,(1 + {}^1\!/_8 \sqrt{\tau})^{-1}, \quad T_\omega = {}^1\!/_2 T\,(1+\tau)$$

В то же время коэффициент пространственной броуновской диффузии [1] $D_r = D_\xi \gamma_\xi^{-2}$ с ростом τ стремится к конечному значению

$$\frac{D_r(\tau=\infty)}{D_r(\tau=1)} = \frac{32}{\pi^2}\left(1 + \frac{\pi}{8}\right)$$

Обобщение на случай зеркально-диффузного отражения может быть получено очевидной комбинацией данных результатов и результатов [2, 3].

ЛИТЕРАТУРА

1. *Климонтович Ю. Л.* Статистическая физика. М.: Наука, 1982. 608 с.
2. *Montgomery D.* Brownian motion from Boltzmann's equation.— Phys. Fluids, 1971, v. 14, № 10, p. 2088–2090.
3. *Fernandez de la Mora J., Mercer J. M.* Modified Fokker-Planck equation for the motion of Brownian particles in a nonuniform gas.— Phys. Rev. A, 1982, v. 26, № 4, p. 2178–2186.
4. *Коган М. Н.* Динамика разреженного газа. М.: Наука, 1967. 440 с.
5. *Иванов С. Г., Яншин А. М.* Силы и моменты, действующие на тела, вращающиеся относительно оси симметрии в свободномолекулярном потоке.— Изв. АН СССР, МЖГ, 1980, № 3, с. 151–155.

Москва

Поступила в редакцию
2.VII.1985