

УДК 533.72

© 2007 г. В. С. ГАЛКИН, С. В. РУСАКОВ

КИНЕТИЧЕСКОЕ УРАВНЕНИЕ ФОККЕРА–ПЛАНКА ДЛЯ БРОУНОВСКИХ СВОБОДНОМОЛЕКУЛЯРНЫХ ТЕРМИЧЕСКИ НЕРАВНОВЕСНЫХ ЧАСТИЦ В НЕОДНОРОДНОМ ГАЗЕ

Получено кинетическое уравнение для функции распределения по поступательным и угловым скоростям броуновских сферических твердых частиц в неоднородном одноатомном газе. Диаметры частиц много меньше средней длины свободного пробега молекул газа, взаимодействием частиц и их влиянием на несущую (газовую) фазу пренебрегается. Температуры частиц T_p одинаковы и отличны от местной температуры газа T . Функция распределения по скоростям молекул дается первым приближением метода Чепмена – Энскога. Разность характерных скоростей фаз мала по сравнению со средней тепловой скоростью молекул. Используя зеркально-диффузный закон отражения молекул от поверхности частицы, найдены зависимости коэффициентов диффузии в пространствах скоростей от отношения T_p/T , характеризующие влияние термической неравновесности, т.е. нарушения термодинамического равновесия между фазами данной дисперсной системы.

Ключевые слова: кинетическое уравнение Фоккера–Планка, броуновские термически неравновесные частицы, мелкодисперсная газозвесь.

Кинетической теории газозвеси и ее приложениям посвящено большое число исследований [1, 2]. В последнее время она получила новый импульс к развитию, обусловленный изучением поведения наночастиц [2]. В теории делается много предположений, что, как известно, определяется сложностью процессов в газозвесьях. В частности, коэффициенты диффузии, входящие в оператор Фоккера–Планка, вычисляются в предположении о локальном термодинамическом равновесии [1]. Важный способ анализа точности теории – рассмотрение простейших случаев, когда удается построить убедительные математические модели. Примером является [3], где было проведено разложение по малому параметру больцмановского интеграла столкновений тяжелых частиц с легкими в предположении, что все частицы – упругие сферы. Результатом был оператор Фоккера–Планка для броуновских свободномолекулярных зеркально отражающих частиц. Далее проведен [4] учет термофоретической силы, действующей на зеркально отражающую сферу в свободномолекулярных условиях (т.е. при числе Кнудсена броуновской частицы $Kn \gg 1$). Позже результаты [3] обобщены на более реалистический закон взаимодействия молекул с поверхностью частиц [5] при отсутствии термодинамического равновесия между газом и частицами и с учетом вращательного движения последних.

Данная заметка завершает исследование [5], где газ предполагался неподвижным при $T = \text{const}$, а коэффициенты в операторе Фоккера–Планка вычислены для случая диффузного отражения. Ниже проведены указанные в аннотации обобщения (попутно исправлены описки в [5]). Как правило, используются обозначения [5].

1. Постановка задачи. Кинетическое уравнение для функции распределения сферических частиц F_p в неподвижной системе отсчета имеет вид

$$\frac{\partial F_p}{\partial t} + \xi_p \cdot \frac{\partial F_p}{\partial \mathbf{r}} = J(F_p), \quad F_p = F_p(\xi_p, \omega_p, \mathbf{r}, t) \quad (1.1)$$

Здесь ξ_p – скорость центра масс (геометрического центра) частицы, ω_p – ее угловая скорость, \mathbf{r} – радиус-вектор, t – время. Внешние массовые силы отсутствуют. Плотность взвешенной фазы (ансамбля частиц) предполагается настолько малой, что столкновения частиц друг с другом и их влияние на параметры течения несущей фазы (газа) несущественны. Диаметр частицы $d = 2R$ много меньше длины свободного пробега, но, однако, много больше размера молекулы, так что частицу можно считать макроскопическим телом, взаимодействующим с газом по законам свободномолекулярных течений (для краткости такие частицы называем свободномолекулярными). Изменением числовой плотности n , скорости \mathbf{U} и температуры T газа на длинах порядка диаметра d пренебрегаем. Разность характерных скоростей фаз много меньше характерной тепловой скорости молекул $c = (2kT/m)^{1/2}$, где k – постоянная Больцмана, m – масса молекулы, т.е. $|\xi_p - \mathbf{U}| \ll c$. Для угловой скорости предполагаем, что $R\omega_p \ll c$.

Перейдем к выводу правой части уравнения (1.1), обусловленной столкновениями молекул газа с поверхностью частицы. В силу приведенного выше введем скорости частиц и молекул относительно местной скорости газа

$$\mathbf{W}_p = \xi_p - \mathbf{U}, \quad \mathbf{W} = \xi - \mathbf{U}, \quad \mathbf{U} = \mathbf{U}(\mathbf{r}, t)$$

В этих предположениях выражение для оператора J выводится, как и в [5], путем вычисления разности образования и убыли числа частиц в элементе фазового объема. Далее сначала применяется разложение по $\varepsilon = m(m_p + m)^{-1} \ll 1$, где m_p – масса частицы, затем учитываются оценки

$$\begin{aligned} W &\sim g \sim c, & W_p &\sim v \ll c \\ \mathbf{g} &= \mathbf{W} - \mathbf{v}, & \mathbf{v} &= \mathbf{W}_p - R(\mathbf{n} \times \omega_p) \end{aligned} \tag{1.2}$$

где \mathbf{n} – внешняя нормаль к элементу поверхности частицы dS , R – ее радиус. Поэтому для функции распределения молекул имеем

$$f(\mathbf{W}) = f(\mathbf{g} + \mathbf{v}) \approx f(\mathbf{g}) + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f(\mathbf{g})}{\partial \mathbf{g}} \tag{1.3}$$

Здесь и ниже для краткости зависимости функций распределения от \mathbf{r} , t не указываются.

В результате в главном приближении получено выражение [5]

$$\begin{aligned} J &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{W}_p} \cdot \left(-\frac{\mathbf{F}}{m_p} F_p \right) + \frac{\partial}{\partial \omega_p} \cdot \left(-\frac{\mathbf{M}}{I} F_p \right) + \\ &+ \frac{\varepsilon}{2m_p} \left\{ \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{W}_p \partial \mathbf{W}_p} : \langle \Delta \mathbf{g} \Delta \mathbf{g} f \rangle F_p + \frac{1}{R^2 \sigma^2 \partial \omega_p \partial \omega_p} : \langle (\mathbf{n} \times \Delta \mathbf{g})(\mathbf{n} \times \Delta \mathbf{g}) f \rangle F_p + \right. \\ &\left. + \frac{2}{R \sigma \partial \mathbf{W}_p \partial \omega_p} : \langle \Delta \mathbf{g}(\mathbf{n} \times \Delta \mathbf{g}) f \rangle F_p \right\} \end{aligned} \tag{1.4}$$

$$-\mathbf{F} = \langle \Delta \mathbf{g} f \rangle + \left\langle \Delta \mathbf{g} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{g}} \right\rangle \cdot \mathbf{W}_p + R \left\langle \Delta \mathbf{g} \left(\mathbf{n} \times \frac{\partial f}{\partial \mathbf{g}} \right) \right\rangle \cdot \omega_p \tag{1.5}$$

$$-\frac{\mathbf{M}}{R} = \langle (\mathbf{n} \times \Delta \mathbf{g}) f \rangle + R \left\langle (\mathbf{n} \times \Delta \mathbf{g}) \left(\mathbf{n} \times \frac{\partial f}{\partial \mathbf{g}} \right) \right\rangle \cdot \omega_p + \left\langle (\mathbf{n} \times \Delta \mathbf{g}) \frac{\partial f}{\partial \mathbf{g}} \right\rangle \cdot \mathbf{W}_p \tag{1.6}$$

$$\Delta \mathbf{g} = \mathbf{g}' - \mathbf{g}, \quad \sigma = I(m_p R^2)^{-1}, \quad f = f(\mathbf{g}), \quad F_p = F_p(\mathbf{W}_p, \omega_p)$$

Здесь “ \times ” обозначает векторное произведение, точка – скалярное произведение векторов (или простое произведение тензора второго ранга на вектор), две точки – двойное произведение тензоров второго ранга [6], штрихом сверху вводятся значения величин после столкновения молекулы с поверхностью частицы, I – момент инерции частицы. Оператор $\langle A \rangle$ определен формулой

$$\langle A \rangle = m \int_{\mathbf{n} \cdot \mathbf{g} < 0} \int_{\mathbf{n} \cdot \mathbf{g}' > 0} \int A H(-\mathbf{n} \cdot \mathbf{g}) H(\mathbf{n} \cdot \mathbf{g}') |\mathbf{n} \cdot \mathbf{g}| P(\mathbf{g}, \mathbf{g}') d\mathbf{g} d\mathbf{g}' dS$$

Функция Хевисайда $H(x)$ равна 1 для $x > 0$ и 0 для $x < 0$, P – плотность вероятности отражения частиц от поверхности, которая, вообще говоря, переменна по поверхности частицы и во времени. Для зеркально-диффузного закона она определена как

$$P(\mathbf{g}, \mathbf{g}') = (1 - \alpha) \delta(\mathbf{g}' - \mathbf{g} + 2\mathbf{n}(\mathbf{n} \cdot \mathbf{g})) + \alpha \frac{2}{\pi} h_p^{-2} |\mathbf{n} \cdot \mathbf{g}'| \exp\left(-\frac{g'^2}{h_p}\right) \quad (1.7)$$

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{g}' > 0, \quad h_p = 2kT_p/m, \quad \alpha = [0, 1] = \text{const}$$

где α – коэффициент диффузности (его называют также коэффициентом аккомодации тангенциального импульса, при $\alpha = 1$ имеем диффузное отражение), δ – дельта-функция. В первом приближении метода Чепмена-Энскога функция распределения молекул f дается выражением

$$f = f_0(W^2)(1 + \psi(\mathbf{W})), \quad \psi(\mathbf{W}) = \psi^T(\mathbf{W}) + \psi^U(\mathbf{W}) \quad (1.8)$$

$$f_0(W^2) = n(h\pi)^{-3/2} \exp\left(-\frac{W^2}{h}\right), \quad h = c^2 = \frac{2kT}{m} \quad (1.9)$$

$$\psi^T = -\frac{1}{n} A(W^2) \mathbf{W} \cdot \nabla \ln T, \quad \psi^U = -\frac{1}{n} B(W^2) \mathbf{W} \mathbf{W} : \mathbf{S} \quad (1.10)$$

где \mathbf{S} – тензор скоростей сдвига.

Учитывая формулы (1.2), (1.3), (1.8), найдем

$$f(\mathbf{g}) = f_0(g^2)(1 + \psi^T(\mathbf{g}) + \psi^U(\mathbf{g})) \quad (1.11)$$

Входящие сюда функции получаются из (1.9), (1.10) заменой \mathbf{W} на \mathbf{g} .

Напомним, что величина ψ порядка числа Кнудсена $\text{Kn} = \lambda/L$, где λ – длина свободного пробега молекул, L – характерная газодинамическая длина, при условии, что относительные изменения температуры и скорости газа на этой длине порядка единицы.

2. Оператор столкновений Фоккера–Планка. Подставим вместо $f(\mathbf{g})$ формулу (1.11) в выражения (1.4)–(1.6), отбрасывая члены более высокого порядка малости. Первые слагаемые формул (1.5), (1.6) принимают вид

$$\langle \Delta \mathbf{g} f \rangle = \langle \Delta \mathbf{g} f_0(1 + \psi) \rangle, \quad \langle (\mathbf{n} \times \Delta \mathbf{g}) f \rangle = \langle (\mathbf{n} \times \Delta \mathbf{g}) f_0(1 + \psi) \rangle$$

$$f_0 = f_0(g^2), \quad \psi = \psi(\mathbf{g}).$$

Во всех остальных слагаемых выражений (1.4)–(1.6) функция f заменяется на f_0 . После этих замен соотношения (1.5) и (1.6) превращаются в выражения для силы \mathbf{F} и вращательного момента \mathbf{M} , действующих на произвольную выпуклую частицу в медленном свободномолекулярном потоке неоднородного газа. В частных случаях получаются известные результаты [7, 8].

В рассматриваемом далее случае сферической частицы с зеркально-диффузным законом отражения молекул от ее поверхности (1.7) ряд интегралов, входящих в выражение (1.4)–(1.6) для J , обращается в нуль. В результате перехода снова к переменной ξ_p , получим

$$J = \frac{\partial}{\partial \xi_p} \cdot \left\{ \gamma_\xi (\xi_p - \mathbf{U}) + \theta \nabla T \right\} F_p + D_\xi \frac{\partial F_p}{\partial \xi_p} \left\} + \frac{\partial}{\partial \omega_p} \cdot \left\{ \gamma_\omega \omega_p F_p + D_\omega \frac{\partial F_p}{\partial \omega_p} \right\} \quad (2.1)$$

$$F_p = F_p(\xi_p, \omega_p, \mathbf{r}, t), \quad \mathbf{U} = \mathbf{U}(\mathbf{r}, t), \quad T = T(\mathbf{r}, t)$$

$$\gamma_\xi = \frac{8}{3} \rho R^2 \sqrt{\pi h} \left(1 + \alpha \frac{\pi}{8} \sqrt{\tau} \right) m_p^{-1} \quad (2.2)$$

$$\theta = \frac{16}{15 m_p} \sqrt{\frac{\pi}{h}} R^2 \lambda, \quad \gamma_\omega = \frac{4}{3} \rho R^4 \sqrt{\pi h} \alpha I^{-1} \quad (2.3)$$

$$D_\xi = \frac{kT}{m_p} \gamma_\xi (1 + \Delta_\xi), \quad D_\omega = \frac{kT}{I} \gamma_\omega (1 + \Delta_\omega) \quad (2.4)$$

$$\Delta_\xi = \alpha \Delta_\omega \left(1 + \alpha \frac{\pi}{8} \sqrt{\tau} \right)^{-1}, \quad \Delta_\omega = \frac{\tau - 1}{2}, \quad \tau = \frac{T_p}{T} \quad (2.5)$$

Здесь $\rho = mn$, λ – коэффициент теплопроводности газа.

Для сферической частицы единственным следствием неоднородности газа является термофоретическая сила, действующая на свободномолекулярную частицу в газе при заданном градиенте температуры [9].

При определении коэффициента θ формулы (2.1) вычисляется интеграл

$$E(n) \equiv \int_0^\infty A(w^2) \exp(-w^2) w^n dw, \quad w^2 = \frac{g^2}{h}, \quad n = 5$$

Функция A входит в выражение (1.10) для ψ^T . В теории теплопроводности вычисляется такой же интеграл, но при $n = 6$. При этом величина $A(w^2)$ представляется рядом по полиномам Сонина и достаточную точность дает первое приближение, т.е. учет одного члена разложения [6]. Максимальная погрешность имеет место в случае молекул – упругих сфер.

Выражение для коэффициента θ , приведенное в первой формуле (2.3), также найдено в первом приближении по полиномам. Используя данные [6], легко получить отношения значений искомого интеграла в первом ($E_1(5)$), втором ($E_2(5)$) и третьем ($E_3(5)$) приближениях по полиномам Сонина для указанного случая

$$E_2/E_1 = 1.045, \quad E_3/E_1 = 1.052$$

т.е. первое приближение отличается от третьего на 5%. Однако для реальных межмолекулярных потенциалов эти отношения значительно меньше отличаются от единицы [9], и первое из выражений (2.3) обладает достаточной точностью.

При $\tau = 1$ выражения (2.2), (2.3) для γ_ξ , γ_ω совпадают с полученными ранее [7, 8].

При $\alpha = 1$ из соотношений (2.1)–(2.4) следуют результаты [5], где в формуле для γ_ξ опущены описки: отсутствует множитель m_p^{-1} и коэффициент π перед $\sqrt{\tau}$. Кроме того, имеются описки в обозначениях момента инерции и угловой скорости.

В отсутствие термической неравновесности (при $\tau = 1$) коэффициенты диффузии (2.4) равны своим значениям

$$D_{\xi}(\tau = 1) = D_{\xi}^{eq} = \frac{kT}{m_p} \gamma_{\xi}, \quad D_{\omega}(\tau = 1) = D_{\omega}^{eq} = \frac{kT}{I} \gamma_{\omega} \quad (2.6)$$

получаемым в предположении о равновесности процесса, т.е. из условия $J = 0, \nabla T = 0$.

Величины Δ , даваемые формулами (2.5) – поправки к равновесным значениям коэффициентов диффузии D^{eq} . Они обусловлены термической неравновесностью ($\tau \neq 1$). Поправка Δ_{ξ} зависит от коэффициента аккомодации α и, по-видимому, более “чувствительна” к деталям законов отражения молекул от стенки, чем поправка Δ_{ω} . Для охлажденных частиц ($\tau < 1$) они отрицательны, для нагретых ($\tau > 1$) – положительны. Поправка Δ_{ω} сильнее зависит от τ , чем поправка Δ_{ξ} . Для предельных случаев $\tau = 0$ и $\tau \gg 1$ имеем соответственно

$$\frac{\Delta_{\xi}}{\alpha} = \Delta_{\omega} = -\frac{1}{2}; \quad \Delta_{\xi} \approx \frac{4\sqrt{\tau}}{\pi}, \quad \Delta_{\omega} \approx \frac{\tau}{2}$$

Заключение. Термическая неравновесность, т.е. отличие отношения температур частицы и газа τ от единицы, приводит к существенным различиям коэффициентов диффузии D_{ξ}, D_{ω} от их обычно используемых термодинамически равновесных значений. Этот вывод необходимо, по-видимому, учитывать в теориях броуновского движения и газозвесей. Зависимости коэффициентов оператора Фоккера–Планка J от τ могут использоваться для экспериментальной проверки этих теорий. Интерес к изучению режима течений смесей газов со свободномолекулярными частицами в настоящее время обусловлен также тем, что он примыкает к режиму течений с наночастицами в качестве взвешенной фазы.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (№ 05-08-33688) и Государственной программы поддержки ведущих научных школ (НШ – 4272.2006.1).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Цибаров В.А. Кинетический метод в теории газозвесей. СПб.: Изд-во СПбГУ, 1997. 191 с.
2. Рудяк В.А. Статистическая аэрогидромеханика гомогенных и гетерогенных сред. Т. 1. Кинетическая теория. Новосибирск. Изд-во НГАСУ, 2004. 320 с.
3. Montgomery D. Brownian motion from Boltzmann's equation // Phys. Fluids. 1971. V. 14. № 10. P. 2088–2090.
4. 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.
5. Борис А.Ю., Галкин В.С. Кинетическое описание броуновского движения нагретых частиц в разреженном газе // Изв. АН СССР. МЖГ. 1986. № 2. С. 157–161.
6. Ferziger J.H., Kaper H.G. Mathematical Theory of Transport Processes in Gases. Amsterdam; London: North-Holland, 1972. = Ферцигер Дж., Капер Г. Математическая теория процессов переноса в газах. М.: Мир, 1976. 554с.
7. Vestner H., Halbritter J. Torque on a small particle in a nongogeneous monatomic gas // Z. Naturforsch. 1981. Bd. 36a. № 6. S. 559–567.
8. Halbritter J. Torque on a rotating ellipsoid in a rarefied gas // Z. Naturforsch. 1974. Bd. 29a. № 12. S. 1717–1722.
9. Waldmann L. Über die kraft eines inhomogenen gases auf kleine suspendierte kugeln // Z. Naturforsch. 1959. Bd. 14a. № 7. S. 589–599.