01;03

О вычислении потока тепла от сферической частицы в молекулярном газе

© С.А. Савков, А.А. Юшканов, Ю.И. Яламов

Орловский государственный университет,
302015 Орел, Россия

(Поступило в Редакцию 9 января 2001 г.)

Рассматривается задача о вычислении потока тепла от сферической частицы в молекулярном газе. Приведены результаты численных расчетов для аналога БГК модели интеграла столкновений при условии чисто диффузного отражения молекул газа от ее поверхности.

Изучение процесса переноса тепла в промежуточном диапазоне значений числа Кнудсена остается одной из актуальных проблем кинетической теории газов. Однако при теоретическом анализе данного явления авторы учитывают лишь поступательные степени свободы, тогда как большинство экспериментов проводится для молекулярных газов, что требует учета внутренних степеней свободы [1]. Вклад конкретных типов движения определяется характером энергетического спектра. Как известно (см., например, [2]), расстояние между уровнями энергии вращательных степеней свободы определяется соотношением $\hbar^2/2J$ (J — момент инерции молекулы) и сравнимо с энергией теплового движения kT лишь для наиболее легких газов. Так, для молекул водорода $\hbar^2/2Jk = 85.4\,\text{K}$. Для более тяжелых молекул эта величина существенно меньше, что позволяет пренебречь дискретным характером энергии вращательного движения и рассматривать вращательные степени свободы в классическом приближении, тогда как колебательные степени свободы возбуждаются при температурах порядка $10^3\,\text{K}$. Поэтому их можно считать полностью замороженными.

Рассмотрим равномерно нагретую до температуры T_w сферическую частицу радиуса R, находящуюся в газе, в котором поддерживается постоянная на бесконечности температура T_0. Перепад температуры $\Delta T = T_w - T_0$ будем полагать достаточно малым для того, чтобы линеаризовать задачу. Введем сферическую систему координат с началом в центре частицы. Состояние окружающего ее газа описывается уравнением [3]

$$C_r\frac{\partial\varphi}{\partial r} + \frac{C^2 - C_r^2}{r}\frac{\partial\varphi}{\partial C_r} = I[\varphi]. \tag{1}$$

Здесь $\mathbf{C} = \mathbf{V}\sqrt{m/2kT_0}$ — обезразмеренная собственная скорость поступательного движения молекул газа, I — интегральный оператор столкновений, φ — поправка к равновесной (максвелловской) функции распределения

$$f_0 = n_0\beta\left(\frac{m}{2\pi kT_0}\right)^{3/2}\exp\left(-\frac{\varepsilon}{kT_0}\right),$$

$$\beta = 1, \qquad \frac{J}{kT_0} \quad \text{и} \quad \frac{(J_1J_2J_3)^{1/2}}{(2\pi kT_0)^{3/2}}$$

для одно-, двух- и многоатомного газа соответственно, J_i — главные моменты инерции молекулы, ε — суммарная кинетическая энергия ее поступательного и вращательного движения.

Учитывая отсутствие надежных моделей потенциала межмолекулярного взаимодействия, ограничимся аналогом БГК модели [4]

$$I[\varphi] = \nu(F - \varphi), \qquad F = \sum_{i=1}^{3} P_iM_i,$$

$$\nu = (s+2)\frac{n_0}{\varkappa}\sqrt{\frac{k^3T_0}{8m}} = \frac{1}{\chi}\sqrt{\frac{kT_0}{2m}},$$

$$M_i = \pi^{-s/2}\int P_i\varphi\exp(-\xi^2)d^s\xi,$$

$$P_1 = 1, \quad P_2 = \sqrt{\frac{2}{s}}\left(\xi^2 - \frac{s}{2}\right), \quad P_3 = \sqrt{2}C_r, \tag{2}$$

где s — число степеней свободы молекул газа, $\varkappa$ и χ — коэффициенты тепло- и температуропроводности; под ξ понимается s-мерный вектор безразмерной обобщенной скорости, первые три компоненты которого $\{\xi_1, \xi_2, \xi_3\} = \mathbf{C}$ описывают поступательное, а остальные $(s-3)$ — вращательное движения молекул, причем, как и в случае поступательных степеней свободы, $\xi_i = \sqrt{\varepsilon_i/kT_0}$.

В качестве граничного условия на поверхности частицы примем закон чисто диффузного отражения молекул газа от поверхности частицы:

$$\varphi\big|_{C_r>0,\ r=R} = \Phi_w = \frac{\Delta n}{n_0} + \left(\xi^2 - \frac{s}{2}\right)\frac{\Delta T}{T_0}. \tag{3}$$

Перепад концентрации молекул газа Δn определяется условием отсутствия массового движения газа, что эквивалентно

$$\int C_r\varphi(R)\exp(-\xi^2)d^s\xi = 0. \tag{4}$$

Отсюда находим

$$\frac{\Delta n}{n_0} = -\frac{1}{2}\frac{\Delta T}{T_0} - 2\pi^{(1-s)/2}\int\limits_{C_r<0} C_r\varphi(R)\exp(-\xi^2)d^s\xi. \tag{5}$$

Искомый поток тепла определяется выражением

$$q = n_0 \sqrt{\frac{2k^3T_0^3}{\pi^s m}} \int C_r \xi^2 \varphi \exp(-\xi^2) d^s\xi$$

и в силу закона сохранения энергии может быть представлен в виде

$$q = n_0 \sqrt{\frac{2k^3T_0^3}{m}} \frac{R^2}{r^2} Q.$$

Безразмерная величина Q может быть вычислена в любой точке, в частности на поверхности частицы, что с учетом (3) и (5) дает

$$Q = \frac{s+1}{4\sqrt{\pi}} \frac{\Delta T}{T_0} + \pi^{-s/2} \int\limits_{C_r<0} C_r \left(\xi^2 - \frac{s+1}{2}\right)$$

$$\times \varphi(R) \exp(-\xi^2) d^s\xi. \tag{6}$$

Очевидно, что в случае мелкой частицы ее влиянием на функцию распределения молекул в объеме газа можно пренебречь и поправку φ в области интегрирования (6) считать равной нулю. Таким образом, первое слагаемое определяет значение потока тепла в свободномолекулярном режиме. Причем этот результат не зависит ни от формы интеграла столкновений, ни от способа решения рассматриваемой задачи.

В газодинамическом пределе, т. е. при $R\nu \gg 1$, функция распределения падающих на частицу молекул определяется распределением Чепмена–Энскога

$$\Phi = \frac{R}{r^2\nu} \frac{\Delta T}{T_0} \left(\xi^2 - \frac{s}{2} - 1\right)(C_r + \nu r),$$

что дает

$$Q_\infty = \frac{s+2}{4} \frac{\Delta T}{T_0} \frac{1}{R\nu} \tag{7}$$

и с учетом определения ν соответствует

$$q = \frac{\varkappa R \Delta T}{r^2}.$$

В этом смысле решения рассматриваемой задачи для одно-, двух- и многоатомного газа совпадают между собой.

Для вычисления потока тепла в промежуточном диапазоне значений числа Кнудсена необходимо решать уравнение (1). Переходя к переменной

$$\mu = \frac{(\mathbf{C}\cdot\mathbf{r})}{Cr},$$

запишем его в виде

$$\mu \frac{\partial\varphi}{\partial r} + \frac{1-\mu^2}{r} \frac{\partial\varphi}{\partial\mu} = \frac{\nu}{C}(F-\varphi). \tag{8}$$

Рассматривая F как заданную функцию, составим систему характеристических уравнений

$$\frac{dr}{\mu} = \frac{r d\mu}{1-\mu^2} = \frac{C}{\nu} \frac{d\varphi}{F-\varphi}.$$

Первое равенство

$$\frac{dr}{\mu} = \frac{r d\mu}{1-\mu^2}$$

решается тривиально и дает уравнение характеристики

$$K_1 = r\sqrt{1-\mu^2}. \tag{9}$$

В качестве второго уравнения возьмем

$$\frac{dr}{\mu} = \frac{C}{\nu} \frac{d\varphi}{F-\varphi}.$$

Подставляя в это уравнение, найденное из (9), значение

$$\mu = \pm\sqrt{1 - K_1^2/r^2},$$

получим

$$\mathrm{sign}(\mu) \sqrt{1 - \frac{K_1^2}{r^2}} \frac{C}{\nu} \frac{d\varphi}{dr} = F - \varphi.$$

Отсюда находим

$$\varphi = K_2 \exp\left(-\mathrm{sign}(\mu) \frac{\nu}{C} \sqrt{r^2 - K_1^2}\right)$$

$$+ \mathrm{sign}(\mu) \frac{\nu}{C} \int\limits_R^r \exp\left(\mathrm{sign}(\mu) \frac{\nu}{C} \left(\sqrt{r_1^2 - K_1^2} - \sqrt{r^2 - K_1^2}\right)\right)$$

$$\times F\left(r_1, \mathrm{sign}(\mu)\sqrt{1 - K_1^2/r_1^2}\right) \frac{r_1 dr_1}{\sqrt{r_1^2 - K_1^2}}. \tag{10}$$

Аргументы функции F означают, что при ее вычислении в качестве r и μ необходимо брать r_1 и $\mathrm{sign}(\mu)\sqrt{1 - K_1^2/r_1^2}$ соответственно. Учитывая структуру (10) и разрывный характер функции распределения вдоль характеристики $r\sqrt{1-\mu^2} = R$, разобьем область изменения переменных (r, μ) на три подобласти: I для $\mu \in [-1, 0]$, II — $\mu \in [0, \sqrt{1 - R^2/r^2}]$ и III — $\mu \in [\sqrt{1 - R^2/r^2}, 1]$.

Для того чтобы различать функции распределения в перечисленных областях, обозначим их соответствующими индексами.

Очевидно, что условие (3) определяет значение функции распределения в области III и соответствует

$$\varphi_3(R, \mu) = \Phi_w. \tag{11}$$

Кроме того, искомое решение должно удовлетворять условию конечности, причем для $\mu > 0$ это требование удовлетворяется автоматически и позволяет определить функцию распределения лишь в области I

$$\varphi_1 \to 0 \quad \text{при} \quad r \to \infty. \tag{12}$$

Значение функции распределения в области II определяется условием ее непрерывности на границе областей I и II, т. е. при $\mu = 0$,

$$\varphi_2(r, 0) = \varphi_1(r, 0). \tag{13}$$

Удовлетворяющее перечисленным условиям решение уравнения (8) может быть представлено в виде

$$\varphi=\varphi_1H_1+\varphi_2H_2+\varphi_3H_3, \qquad (14)$$

где

$$H_1=H(-\mu),\quad H_3=H(\mu-\sqrt{1-R^2/r^2}),$$

$$H_2=1-H_1-H_3,\quad H(x)=\frac{|x|+x}{2x}$$

— стандартная функция Хевисайда,

$$\varphi_1=\frac{\nu}{C}\int\limits_r^\infty \exp\left(-\frac{\nu}{C}\left(r\mu+\sqrt{r_1^2-r^2(1-\mu^2)}\right)\right)$$

$$\times F\left(r_1,-\sqrt{1-\frac{r^2}{r_1^2}(1-\mu^2)}\right)\frac{r_1dr_1}{\sqrt{r_1^2-r^2(1-\mu^2)}}, \qquad (15)$$

$$\varphi_2=\frac{\nu}{C}\int\limits_{r\sqrt{1-\mu^2}}^\infty \exp\left(-\frac{\nu}{C}\left(r\mu+\sqrt{r_1^2-r^2(1-\mu^2)}\right)\right)$$

$$\times F\left(r_1,-\sqrt{1-\frac{r^2}{r_1^2}(1-\mu^2)}\right)\frac{r_1dr_1}{\sqrt{r_1^2-r^2(1-\mu^2)}}$$

$$+\frac{\nu}{C}\int\limits_{r\sqrt{1-\mu^2}}^{r} \exp\left(\frac{\nu}{C}\left(\sqrt{r_1^2-r^2(1-\mu^2)}-r\mu\right)\right)$$

$$\times F\left(r_1,\sqrt{1-\frac{r^2}{r_1^2}(1-\mu^2)}\right)\frac{r_1dr_1}{\sqrt{r_1^2-r^2(1-\mu^2)}}, \qquad (16)$$

$$\varphi_3=\Phi_w\exp\left(\frac{\nu}{C}\left(\sqrt{R-r^2(1-\mu^2)}-r\mu\right)\right)$$

$$+\frac{\nu}{C}\int\limits_R^r \exp\left(\frac{\nu}{C}\left(\sqrt{r_1^2-r^2(1-\mu^2)}-r\mu\right)\right)$$

$$\times F\left(r_1,\sqrt{1-\frac{r^2}{r_1^2}(1-\mu^2)}\right)\frac{r_1dr_1}{\sqrt{r_1^2-r^2(1-\mu^2)}}. \qquad (17)$$

Подстановка (14)–(17) в определение (2) приводит к системе интегральных уравнений относительно M_i. Причем интегрирование по компонентам обобщенной скорости, соответствующим вращательным степеням свободы, выполняется аналитически. Для этого функцию распределения следует рассматривать как вектор

$$\varphi=\varphi^1e_1+\varphi^2e_2,\quad e_1=1,$$

$$e_2=\sqrt{\frac{2}{s-3}}\left(\xi^2-C^2-\frac{s-3}{2}\right). \qquad (18)$$

Тогда интегрирование может быть представлено в виде скалярного произведения

$$\pi^{(3-s)/2}\int P\varphi\prod_{l=s-3}^{s}\exp(-\xi_l^2)d\xi_l=(P\varphi)=P^1\varphi^1+P^2\varphi^2.$$

Кроме того, в силу (4) $M_3=0$. В результате задача сводится к системе двух интегральных уравнений

$$M_i(r)=\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int\limits_0^\infty\left(\left(\int\limits_{-1}^0(P_i\varphi_1)d\mu+\int\limits_0^{\sqrt{1-R^2/r^2}}(P_i\varphi_2)d\mu\right.\right.$$

$$\left.\left.+\int\limits_{\sqrt{1-R^2/r^2}}^1(P_i\varphi_3)d\mu\right)C^2\exp(-C^2)dC\quad(i=1,2),\right.$$

$$\varphi_1=\frac{\nu}{C}\sum_{j=1}^2P_j\int\limits_r^\infty\exp\left(-\frac{\nu}{C}\left(r\mu+\sqrt{r_1^2-r^2(1-\mu^2)}\right)\right)$$

$$\times\frac{M_j(r_1)r_1dr_1}{\sqrt{r_1^2-r^2(1-\mu^2)}},$$

$$\varphi_2=\frac{\nu}{C}\sum_{j=1}^2P_j\int\limits_{r\sqrt{1-\mu^2}}^r\exp\left(\frac{\nu}{C}\left(\sqrt{r_1^2-r^2(1-\mu^2)}-r\mu\right)\right)$$

$$\times\frac{M_j(r_1)r_1dr_1}{\sqrt{r_1^2-r^2(1-\mu^2)}}$$

$$+\frac{\nu}{C}\sum_{j=1}^2P_j\int\limits_{r\sqrt{1-\mu^2}}^\infty\exp\left(-\frac{\nu}{C}\left(r\mu+\sqrt{r_1^2-r^2(1-\mu^2)}\right)\right)$$

$$\times\frac{M_j(r_1)r_1dr_1}{\sqrt{r_1^2-r^2(1-\mu^2)}},$$

$$\varphi_3=\frac{\nu}{C}\sum_{j=1}^2P_j\int\limits_R^r\exp\left(\frac{\nu}{C}\left(\sqrt{r_1^2-r^2(1-\mu^2)}-r\mu\right)\right)$$

$$\times\frac{M_j(r_1)r_1dr_1}{\sqrt{r_1^2-r^2(1-\mu^2)}}+$$

$$+\Phi_w\exp\left(\frac{\nu}{C}\left(\sqrt{R^2-r^2(1-\mu^2)}-r\mu\right)\right), \qquad (19)$$

где

$$P_1^1=1,\quad P_1^2=0,\quad P_2^1=\sqrt{\frac{2}{s}}\left(C^2-\frac{3}{2}\right),\quad P_2^2=\sqrt{1-\frac{3}{s}},$$

$$\Phi_w^1=(C^2-2)\frac{\Delta T}{T_0}-4\int\limits_0^\infty C^3\exp(-C^2)dC\int\limits_{-1}^0\mu\varphi_1^1d\mu,$$

$$\Phi_w^2 = \sqrt{\frac{s-3}{2}}\,\frac{\Delta T}{T_0}.$$

А соотношение (6) принимает вид

$$Q = \frac{s+1}{4\sqrt{\pi}}\,\frac{\Delta T}{T_0} + \frac{2\nu}{\sqrt{\pi}} \sum_j \int\limits_0^\infty P_j^1 C^2 (C^2-2)dC \int\limits_{-1}^0 \mu d\mu$$

$$\times \int\limits_R^\infty M_j(r_1) \exp\left(-\frac{\nu}{C}\left(R\mu + \sqrt{r_1^2 - R^2(1-\mu^2)}\right) - C^2\right)$$

$$\times \frac{r_1 dr_1}{\sqrt{r_1^2 - R^2(1-\mu^2)}},$$

Решение полученной системы уравнений будем искать в виде ряда по полиномам Чебышева. Ограничиваясь первыми K его членами, запишем

$$M_i(r) = \sum_{j=0}^K A_j^i T_j(\rho(r)), \quad \rho = 1 - 2\exp(-\gamma\sqrt{r^2 - R^2}).$$

Коэффициенты разложения определяются условием

$$\sum_{k=0}^K \sum_{l=0}^K T_j(\rho_l) T_k(\rho_l) = \frac{K+1}{2}(\delta_{0j}+1)\delta_{jk},$$

$$\rho_l = \cos\frac{(2l+1)\pi}{2K+2}.$$

Величина γ подбирается из требования, чтобы большинство узлов интерполяции лежало в области основного изменения функции распределения.

Полученные результаты представлены на рис. 1. Кривая *1* соответствует одно-, кривая *2* — двух- и кривая *3* — многоатомному газу. Кружками отмечены приведенные в [5] результаты непосредственного численного интегрирования рассматриваемой модели кинетического уравнения для атомарного газа.

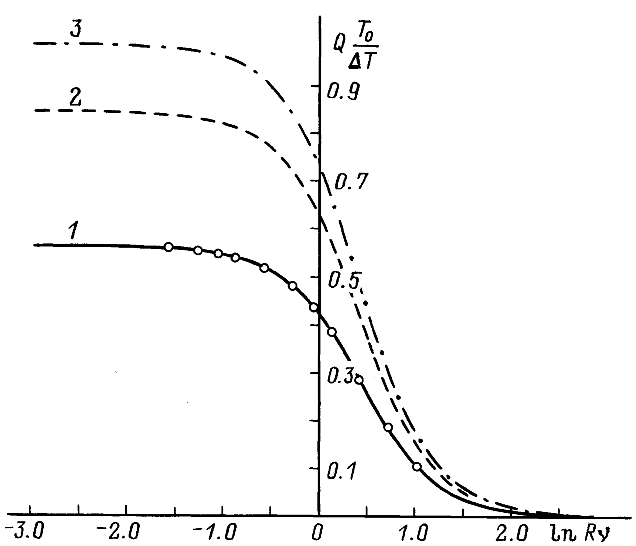

Рис. 1. Зависимость потока тепла от размера частицы. Кружки — приведенные в [5] значения Q для рассматриваемой модели интеграла столкновений в случае атомарного газа.

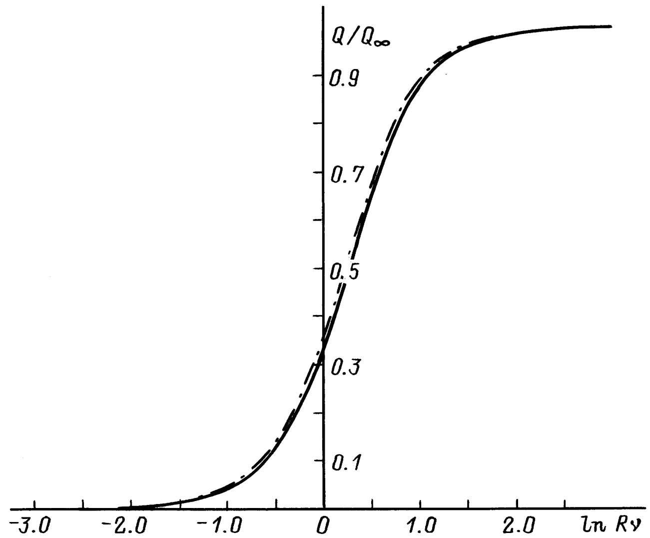

Рис. 2. Графики отношения Q к газодинамическому решению (7).

Следует отметить, что большинство авторов приводит результаты в виде отношения Q к газодинамическому решению Q_∞. Как видно из рис. 2, такое представление результатов не отражает реальной зависимости потока тепла от размера частицы и приводит к неправомерному выводу [6] об одинаковом поведении экспериментальных данных для одно- и многоатомных газов. При этом общий характер кривых согласуется с приведенными в [6] данными и результатами более поздних экспериментов [7].

Заметим также, что идея преобразования уравнения Больцмана в систему интегральных уравнений относительно моментов функции распределения использовалась при рассмотрении подобных задач в [8–10]. Для решения составленной системы авторы [8,9] применяли вариационный метод. При этом пробная фукнция выбиралась из условия точного асимптотического поведения макроскопических параметров в газодинамической области. В результате поток тепла задавался соотношением $q = C_1/r^2$, что действительно выполняется (в силу закона сохранения энергии). Тогда как поле температуры и концентрации определялись в виде $T = C_2/r$ и $n = C_3/r$, справедливом лишь на достаточно большом удалении от частицы. Постоянные C_i вычислялись из условия минимальности соответствующего функционала. В [10] использовался метод Галеркина. Однако пробная функция выбиралась из аналогичных соображений.

Использование полиномов Чебышева позволяет избежать дополнительного интегрирования, необходимого в методе Галеркина, что существенно уменьшает время расчетов и делает возможным учет большего числа полиномов.

Список литературы

[1] *Жданов В.М., Алиевский М.Я.* Процессы переноса и релаксации в молекулярных газах. М.: Наука, 1989. 336 с.
[2] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Статистическая физика. Ч. I. Т. 5. М.: Наука, 1976. 584 с.
[3] *Коган М.Н.* Динамика разреженного газа. М.: Наука, 1967. 440 с.
[4] *Latyshev A.V., Yushkanov A.A.* // Mathematical Models of Non-Linear Excitations, Transfer, Dynamics and Control in Condensed Systems and Other Media / Ed. by Uvarova et al. Kluver Academic / Plenum Publishers (New York), 1999. P. 3–16.
[5] *Takata S., Sone Y., Lhuillier D., Wakabayashi M.* // Computers Math. Appl. 1998. Vol. 35. N 1/2. P. 193–214.
[6] *Lees L., Liu Chung-Yen* // Physic Fluids. 1962. Vol. 5. N 10. P. 1137–1148.
[7] *Semyonov Yu.G., Borisov S.F., Suetin P.E.* // J. Heat Mass Transfer. 1986. Vol. 27. N 10. P. 1789–1799.
[8] *Cercignani C., Pagani C.D.* // Rarefied Gas Dynamics. 1967. Vol. 2. P. 555–573.
[9] *Маргилевский А.Е., Черняк П.Е., Суетин П.Е.* // ИФЖ. 1980. Т. 39. № 3. С. 428–434.
[10] *Chernyak V.G., Margilevskiy A.Ye.* // J. Heat Mass Transfer. 1986. Vol. 32. N 11. P. 2127–2134.