ЖЭТФ, 1998, том 114, вып. 3(9), стр. 956–971

СКАЧОК ТЕМПЕРАТУРЫ И СЛАБОЕ ИСПАРЕНИЕ В МОЛЕКУЛЯРНЫХ ГАЗАХ

А. В. Латышев, А. А. Юшканов

Московский педагогический университет
107005, Москва, Россия

Поступила в редакцию 7 августа 1997 г.

Построены модельные кинетические уравнения, описывающие поведение молекулярных (двухатомных и многоатомных) газов с частотой столкновений молекул, пропорциональной их скорости. При выводе уравнений учтены внутренние (вращательные) степени свободы, колебательные считаются «замороженными». Получено точное решение задачи о температурном скачке с учетом слабого испарения с жидкой поверхности в атмосферу насыщенного пара. В явном виде получены формулы для вычисления коэффициентов скачка температуры и скачка плотности газа над плоской поверхностью и проведены численные расчеты.

1. ВВЕДЕНИЕ. ВЫВОД ОСНОВНЫХ УРАВНЕНИЙ И ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Задача о скачке температуры (задача Смолуховского) привлекает к себе неизменное внимание уже в течение длительного времени (историю этого вопроса см. в [1, 2]). Для простого газа эта задача решалась как с использованием аналитических методов для модельных уравнений [3], так и приближенных и численных методов для уравнения Больцмана [4–7]. Наряду с задачей Смолуховского большой интерес представляет изучение поведения газа при слабом испарении с поверхности [8–11].

Все отмеченные выше работы относились к случаю одноатомного газа. В то же время несомненный интерес представляет изучение поведения молекулярного газа при указанных процессах вблизи поверхности. Известно, что кинетические процессы в молекулярном газе отличаются большей сложностью по сравнению со случаем простого газа [12]. Данное обстоятельство приводит к повышению роли модельных интегралов столкновений при описании кинетических процессов, так как сечения упругого и неупругого рассеяния, входящие в интеграл столкновений Больцмана, изучены в большинстве случаев недостаточно для детального количественного описания.

Модельные интегралы столкновений могут иметь в принципе разную структуру в зависимости от характера явлений, наиболее существенных для данной задачи. В дальнейшем мы будем рассматривать диапазон температур, в котором колебательные степени свободы эффективно «заморожены», в то время как вращательные степени свободы допускают классическое описание. Диапазон температур, в котором это условие выполнено, лежит обычно в пределах от десятков до тысяч градусов Кельвина [13].

Существует целый ряд подходов к построению модельных кинетических уравнений для молекулярных газов (см., например, [14–17]). В ряде подходов учитывают дискретную структуру уровней внутренней энергии молекул. Этот учет необходим при низких температурах, в то время как при высоких температурах дискретная структура уровней не проявляется и ее учет является излишним и неудобным в практических приложениях. В связи с этим мы будем использовать подход, предложенный в [17] (аналогичный, хотя и несколько отличный подход разрабатывался в [14, 15]), основанный на возможности использования квазиклассического приближения для описания вращательных степеней свободы при высоких температурах.

В работе [17] рассматривалась модель молекулярного двухатомного газа с постоянной частотой столкновений (не зависящей от скорости молекул). Не меньший интерес представляет модель с постоянной длиной свободного пробега молекул, что близко к модели молекул как твердых сфер [2, 11]. Постоянство длины свободного пробега соответствует частоте столкновений, пропорциональной скорости молекул.

В настоящей работе предлагается модельное уравнение Больцмана типа БГК (Бхатнагар, Гросс, Крук) для молекулярных газов (как двухатомных, так и многоатомных) с частотой столкновений молекул, пропорциональной скорости молекул. На основе этой модели строятся аналитические решения для задач температурного скачка и слабого испарения.

Интеграл столкновений для простого газа с частотой столкновений, пропорциональной их скорости, имеет следующий вид [2, 11]:

$$J[f] = \frac{w}{\lambda_0}(f_{eq} - f). \tag{1}$$

Здесь λ_0 — характерная длина свободного пробега молекул, $w = |\mathbf{v} - \mathbf{u}_0(\mathbf{r})|$ — модуль скорости молекулы в системе отсчета, относительно которой газ в данной точке $\mathbf{r}$ покоится, т. е. имеет среднемассовую скорость, равную нулю; $\mathbf{v}$ — молекулярная скорость газа в лабораторной системе отсчета, $\mathbf{u}_0(\mathbf{r})$ — среднемассовая скорость газа в точке $\mathbf{r}$ в лабораторной системе отсчета. Функция f_{eq} имеет следующий вид

$$f_{eq} = n_{eq}\left(\frac{m}{2\pi k T_{eq}}\right)^{3/2} \exp\left[-\frac{m}{2kT_{eq}}(\mathbf{v} - \mathbf{u}_{eq})\right],$$

где m — масса молекулы, k — постоянная Больцмана.

Величины n_{eq}, T_{eq} и $\mathbf{u}_{eq}$ определяются из условия, при котором интеграл столкновений (1) удовлетворяет законам сохранения числа молекул, импульса и энергии. Эти требования можно записать в виде уравнения

$$\int wM_1 f_{eq} d^3v = \int wM_1 f d^3v. \tag{2}$$

Здесь $M_1 = 1; \quad m\mathbf{v}; \quad mv^2/2$.

Интеграл столкновений для двухатомного газа можно представить в виде, аналогичном (1). При этом f_{eq} записывается в следующем виде:

$$f^* = n^*\left(\frac{m}{2\pi kT^*}\right)^{3/2}\left(\frac{J}{2kT^*}\right)\exp\left[-\frac{J\omega^2}{2kT^*} - \frac{m}{2kT^*}(\mathbf{v} - \mathbf{u}^*)^2\right].$$

Здесь J — момент инерции молекулы, ω — частота ее вращения.

Величины n^*, T^* и $\mathbf{u}^*$ также определяются из законов сохранения, которые представляют собой обобщения соотношений (2), а именно

$$\int wM_2 f^* \omega d^3v d\omega = \int wM_2 \omega d^3v\, d\omega, \tag{3}$$

где $M_2 = 1; \quad m\mathbf{v}; \quad mv^2/2 + J\omega^2/2$.

Для молекулярных газов, число атомов в молекуле которого три и более (в дальнейшем такие газы будем называть многоатомными), функцию f_{eq} можно представить в следующем виде

$$f^* = n^* \left(\frac{m}{2\pi kT^*}\right)^{3/2} \frac{(J_1J_2J_3)^{1/2}}{(2\pi kT^*)^{3/2}} \exp\left[-\frac{m}{2kT^*}(\mathbf{v}-\mathbf{u}^*)^2 - \frac{J_1\omega_1^2 + J_2\omega_2^2 + J_3\omega_3^2}{2kT^*}\right].$$

Здесь J_1, J_2, J_3 — главные моменты инерции молекулы, $(\omega_1, \omega_2, \omega_3)$ — вектор угловой скорости вращения [13, 18].

Величины n^*, T^* и $\mathbf{u}^*$ определяются из законов сохранения, которые в данном случае имеют вид

$$\int wM_3f^*d^3vd^3\omega = \int wM_3fd^3vd^3\omega, \tag{4}$$

где $M_3 = 1; \quad m\mathbf{v}; mv^2/2 + (J_1\omega_1^2 + J_2\omega_2^2 + J_3\omega_3^2)/2$.

Концентрация n, скорость $\mathbf{u}$ и температура T газа определяются следующими соотношениями [1, 13]:

$$n = \int f\omega d^3vd\omega, \quad \mathbf{u} = \frac{1}{n}\int f\mathbf{v}d^3vd\omega, \quad T = \frac{2}{5n}\int f\left[\frac{1}{2}m(\mathbf{v}-\mathbf{u})^2 + \frac{1}{2}J\omega^2\right]\omega d^3vd\omega$$

для двухатомного газа и

$$n = \int fd^3v\,d^3\omega, \qquad \mathbf{u} = \frac{1}{n}\int f\mathbf{v}d^3vd^3\omega,$$

$$T = \frac{1}{3n}\int f\left[\frac{1}{2}m(\mathbf{v}-\mathbf{u})^2 + \frac{1}{2}(J_1\omega_1^2 + J_2\omega_2^2 + J_3\omega_3^2)\right]d^3vd^3\omega$$

для полиатомного газа.

Предположим, что в рассматриваемой нами области газа температура T изменяется медленно, т. е. относительное изменение температуры на длине свободного пробега молекул газа l мало:

$$l|\nabla \ln T| \ll 1. \tag{5}$$

В дальнейшем нас будет интересовать взаимодействие газа с поверхностью конденсированной фазы. Будем предполагать, что в системе отсчета, в которой конденсированная фаза покоится, скорость газа u мала по сравнению со звуковой, т. е.

$$\sqrt{\frac{m}{2kT}}u \ll 1. \tag{6}$$

Можно показать [1, 2], что из условий (5) и (6) следует, что

$$\sqrt{\frac{m}{2kT}}u^* \ll 1. \tag{7}$$

Условие (5) позволяет выделить область газа, размер которой много больше длины свободного пробега, в которой относительные изменения температуры малы, т. е.

$$\frac{|T - T_0|}{T_0} \ll 1. \tag{8}$$

Здесь T_0 — температура газа в некоторой точке рассматриваемой области.

При выполнении условий (7) и (8) кинетическое уравнение допускает линеаризацию. При этом модуль скорости w в правой части уравнения (1) можно заменить в линейном приближении на v. Функцию распределения f можно представить в виде $f = f_0(1 + \varphi)$, где

$$f_0 = n_0 \left(\frac{m}{2\pi k T_0}\right)^{3/2} \frac{J}{2kT_0} \exp\left(-\frac{mv^2}{2kT_0} - \frac{J\omega^2}{2kT_0}\right)$$

для двухатомного газа и

$$f_0 = n_0 \left(\frac{m}{2\pi k T_0}\right)^{3/2} \frac{(J_1 J_2 J_3)^{1/2}}{(2\pi k T_0)^{3/2}} \exp\left[-\frac{mv^2}{2kT_0} - \frac{J_1\omega_1^2 + J_2\omega_2^2 + J_3\omega_3^2}{2kT_0}\right]$$

для многоатомного газа.

При выполнении условий (5), (7) и (8) функция φ мала, т. е. $|\varphi| \ll 1$. Отметим, что в соответствии с определением в выборе T_0 имеется определенный произвол. На самом деле допустимо вместо T_0 и n_0 выбрать другие параметры T_0' и n_0', удовлетворяющие условиям $|T_0 - T_0'| \ll \max(T_0, T_0')$ и $|n_0 - n_0'| \ll \max(n_0, n_0')$. При этом вся процедура линеаризации остается в силе. Изменится только величина φ. При этом условие линеаризации ($|\varphi| \ll 1$) сохранится.

Стационарное линеаризованное уравнение Больцмана с модельным интегралом столкновений в форме БГК для молекулярного газа имеет вид

$$(\mathbf{v}\nabla\varphi) + \frac{v\varphi}{\lambda_0} = \frac{v}{\lambda_0}\left[\frac{\delta n}{n_0} + \frac{\delta T}{T_0}\left(\frac{mv^2}{2kT_0} + \frac{[J\omega^2]}{2kT_0} - l\right) + \frac{m}{kT_0}\mathbf{u}^*\mathbf{v}\right]. \tag{9}$$

Здесь $\delta n = n^* - n_0$, $\delta T = T^* - T_0$, $\varphi = \varphi(\mathbf{r}, \mathbf{v}, \omega)$, причем $l = 3$, $[J\omega^2] = J\omega^2$ для двухатомного газа, $l = 7/2$, $[J\omega^2] = J_1\omega_1^2 + J_2\omega_2^2 + J_3\omega_3^2$ для многоатомного газа.

В задаче Смолуховского и задаче о слабом испарении имеется плоская поверхность раздела газ — конденсированная фаза. На поверхности могут происходить процессы испарения и конденсации. Рассмотрим область газа, примыкающую к поверхности, размер которой L существенно превышает длину свободного пробега молекул газа. В то же время размер области будем считать достаточно малым, чтобы выполнялось условие (8). Условие (5) гарантирует существование такой области. Пусть существует поток тепла, нормальный к поверхности. Тогда вдали от поверхности (вне слоя Кнудсена толщиной порядка длины свободного пробега) в этой области существует линейный градиент температуры, перпендикулярный поверхности [1, 19]. Введем декартову систему координат с центром на поверхности и осью x, перпендикулярной поверхности, причем область (полупространство), заполненное газом, соответствует положительной оси x. Тогда $T = T_e + Ax$, $l \ll x \ll L$. Здесь $A = \left(dT/dx\right)_{as}$ — асимптотическое значение градиента температуры. Обозначим температуру поверхности через T_s, а через n_s обозначим концентрацию насыщенного пара при температуре поверхности. Тогда величины $T_e - T_s$ и $n_e - n_s$ называются соответственно скачком температуры и скачком концентрации, причем во втором случае предполагается наличие испарения или конденсации с нулевой скоростью. В линейном приближении эти величины пропорциональны градиенту температуры. Скачок температуры равен разности между линейно экстраполированной к поверхности температурой газа и температурой поверхности. Иначе говоря, это — разность между «гидродинамической» (без учета слоя Кнудсена) температурой газа и температурой поверхности. Цель этой работы состоит в вычислении относительных величин скачка температуры и концентрации $\varepsilon_T = T_e/T_s - 1$ и $\varepsilon_n = n_e/n_s - 1$, которые в линейном приближении пропорциональны относительному градиенту температуры, т. е. $\varepsilon_T = c_t K$, $\varepsilon_n = c_n K$, $K = A/T_s$.

Вдали от поверхности возможно также движение газа к поверхности или от нее, что соответствует конденсации или испарению. Обозначим через U скорость испарения или конденсации (отметим, что она перпендикулярна поверхности). В этом случае в линейном приближении относительные скачки температуры и концентрации газа пропорциональны скорости U: $\varepsilon_T = s_t(2U)$, $\varepsilon_n = s_n(2U)$.

Величины c_t, c_n, s_t и s_n требуется определить из решения кинетического уравнения.

Как видно из постановки задачи, функция распределения зависит только от одной пространственной переменной x. Удобно ввести следующие безразмерные переменные:

$$x^* = x/\lambda_0, \quad \xi = \sqrt{m/2kT_0}\, v, \quad \omega^* = \sqrt{[J\omega^2]/2kT_0}\, \omega, \quad \mu = v_x/v, \quad U^* = \sqrt{m/2kT_0}U.$$

В дальнейшем знак «звездочка» у переменных x^*, ω^* и величины U^* будем опускать. При этом с учетом соотношений (3) и (4) уравнение (9) перепишется в следующем виде

$$\mu\frac{\partial\varphi}{\partial x} + \varphi(x,\mu,\xi,\omega) =$$
$$= \int\limits_{-1}^{1}\int\limits_{0}^{\infty}\int\limits_{0}^{\infty} \exp(-\xi'^2 - \omega'^2) k(\mu,\xi,\omega;\mu',\xi',\omega')\varphi(x,\mu',\xi',\omega')d\mu' d\xi' d\omega', \tag{10}$$

где

$$k(\mu,\xi;\mu',\xi') = \frac{2r}{\pi^{(r-1)/2}}\left[1+\frac{3}{2}\mu\xi\mu'\xi'+\frac{r}{4r-1}\left(\xi^2+\omega^2-\frac{4r-1}{r}\right)\left(\xi'^2+\mu'^2-\frac{4r-1}{r}\right)\right],$$

причем $r = 1$ для двухатомного газа, $r = 2$ для многоатомного газа, ω — модуль угловой скорости вращения молекулы в обоих случаях.

Вдали от стенки функция φ имеет следующий вид:

$$\varphi_{as}(x,\mu,\xi,\omega) = \varepsilon_n+\varepsilon_T\left(\xi^2+\omega^2-\frac{7r-2}{2r}\right)+\left(2U-\frac{2K}{3\sqrt{\pi}}\right)\mu\xi+K(x-\mu)\left(\xi^2+\omega^2-\frac{9r-2}{2r}\right).$$

Проблема граничных условий для молекулярного газа на поверхности носит в общем случае весьма сложный характер [20]. Ниже мы ограничимся случаем полной аккомодации молекул на поверхности [1, 2]. Тогда граничное условие на поверхности принимает простой вид:

$$\varphi(0,\mu,\xi,\omega) = 0, \qquad 0 < \mu < 1, \tag{11}$$

а вдали от стенки имеем

$$\varphi(x,\mu,\xi,\omega) = \varphi_{as}(x,\mu,\xi,\omega) + o(1), \quad x \to +\infty, \quad -1 < \mu < 0. \tag{12}$$

2. ДВУХАТОМНЫЙ ГАЗ

Рассмотрим граничную задачу (10) — (12) для случая двухатомного газа, т. е. положим в этих уравнениях $r = 1$. Разложим функцию φ по трем ортогональным направлениям:

$$\varphi = \varphi_{as}(x, \mu, \xi, \omega) + h_1(x, \mu) + \xi h_2(x, \mu) + (\xi^2 + \omega^2 - 3) h_3(x, \mu). \tag{13}$$

Ортогональность понимается как равенство нулю скалярного произведения

$$(f, g) = 2 \int\limits_{-1}^{1} \int\limits_{0}^{\infty} \int\limits_{0}^{\infty} \exp(-\xi^2 - \omega^2) \xi^3 \omega f(\mu, \xi, \omega) g(\mu, \xi, \omega) d\mu d\xi d\omega. \tag{14}$$

Подставляя разложение (13) в (10), получаем систему кинетических уравнений:

$$\mu \frac{\partial h_1}{\partial x} + h_1 = (1, h_1) + 4\alpha(1, h_2), \tag{15а}$$

$$\mu \frac{\partial h_2}{\partial x} + h_2 = 3\mu \left[2\alpha(\mu', h_1) + (\mu', h_2) + \alpha(\mu', h_3) \right], \tag{15б}$$

$$\mu \frac{\partial h_3}{\partial x} + h_3 = \frac{2}{3} \alpha(1, h_2) + (1, h_3). \tag{15в}$$

Скалярное произведение (14) при вычислении внутренних интегралов упрощается, и в системе (15) оно означает следующее:

$$(\mu^k, h_l) = \frac{1}{2} \int\limits_{-1}^{1} \mu'^k h_l(x, \mu') d\mu', \quad k = 0, 1; \quad l = 1, 2, 3.$$

Воспользуемся законами сохранения (3). Законы сохранения числа частиц и энергии позволяют упростить систему (15). Из этих законов получаем $(\mu, \varphi) = 0$ и $(\mu(\xi^2 + \omega^2), \varphi) = 0$. Подставляя разложение (13) в эти равенства, находим:

$$(\mu', h_1) = -4\alpha(\mu', h_2) \qquad (\mu', h_3) = -\frac{2}{3} \alpha(\mu', h_2).$$

Теперь уравнение (15б) упрощается:

$$\mu \frac{\partial h_2}{\partial x} + h_2 = 3c\mu(\mu', h_2), \tag{16}$$

где $c = 1 - 39\pi/128$.

Из уравнений (15а) и (15в) видно, что вместо функции h_3 удобнее рассматривать разность $\tilde{h}_3 = h_1 - 6h_3$, для которой получаем уравнение

$$\mu \frac{\partial \tilde{h}_3}{\partial x} + \tilde{h}_3 = (1, \tilde{h}_3) \tag{17}$$

с граничными условиями

$$\tilde{h}_3(0,\mu) = 0, \qquad 0 < \mu < 1,$$

$$\tilde{h}_3(x,\mu) = \varepsilon_n - \frac{11}{2}\varepsilon_T - \frac{13}{2}K(x-\mu), \quad x \to \infty, \quad -1 < \mu < 0.$$

Систему уравнений (15а), (16) и (17) запишем в векторном виде:

$$\mu\frac{\partial h}{\partial x} + h(x,\mu) = \frac{1}{2}\int\limits_{-1}^{1} K(\mu,\mu')h(x,\mu')d\mu'. \tag{18}$$

Здесь h — вектор с элементами $h_1, h_2, \tilde{h}_3$, $K(\mu,\mu') = K_0 + 3c\mu\mu' K_1$ — ядро уравнения, в котором

$$K_0 = \begin{bmatrix} 1 & 4\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \qquad K_1 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Граничные условия (11) и (12) для уравнения (18) запишутся в виде

$$h(0,\mu) = -h_{as}(0,\mu), \qquad 0 < \mu < 1, \tag{19}$$

$$h(\infty,\mu) = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \qquad -1 < \mu < 0, \tag{20}$$

где

$$h_{as}(x,\mu) = \begin{bmatrix} \varepsilon_n + \varepsilon_T/2 - K(x-\mu)/2 \\ \left(2U - 2K/3\sqrt{\pi}\right)\mu \\ \varepsilon_n - 11\varepsilon_T/2 - 13K(x-\mu)/2 \end{bmatrix}.$$

Перейдем к решению граничной задачи (18)–(20). Разделение переменных в уравнении (18) сразу приводит к частным решениям:

$$h_\eta(x,\mu) = \exp(-\frac{x}{\eta})\Phi(\eta,\mu),$$

причем $\Phi(\eta,\mu)$ — собственная вектор-функция характеристического уравнения

$$(\eta-\mu)\Phi(\eta,\mu) = \frac{1}{2}\eta\left[K_0 n_0(\eta) + 3c\mu K_1 n_1(\eta)\right], \tag{21}$$

где

$$n_k(\eta) = \int\limits_{-1}^{1} \mu^k \Phi(\eta,\mu)d\mu, \qquad k = 0, 1. \tag{22}$$

Решение уравнений (21) и (22) при $\eta \in (-1, 1)$ возьмем в пространстве обобщенных функций (см. [21]) $\Phi(\eta, \mu) = F(\eta, \mu) n_0(\eta)$, где

$$F(\eta, \mu) = \frac{1}{2}\eta K(\mu\eta) P \frac{1}{\eta - \mu} + \Lambda(\eta)\delta(\eta - \mu). \tag{23}$$

Здесь Px^{-1} — символ главного значения интеграла от x^{-1}, $\delta(x)$ — дельта-функция Дирака, $\Lambda(z)$ — дисперсионная матрица-функция,

$$\Lambda(z) = E + \frac{1}{2} z \int\limits_{-1}^{1} K(\mu z) \frac{d\mu}{\mu - z},$$

где E — единичная матрица, или $\Lambda(z) = \lambda_c(z) K(z^2) + K_2$, где

$$K_2 = \begin{bmatrix} 0 & -4\alpha & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \lambda_c(z) = 1 + z t(z), \quad t(z) = \frac{1}{2} \int\limits_{-1}^{1} \frac{d\tau}{\tau - z},$$

$\lambda_c(z)$ — дисперсионная функция Кейза (см. [22]).

Дисперсионной функцией $\lambda(z)$ по определению [22] называется определитель дисперсионной матрицы:

$$\lambda(z) \equiv \det \Lambda(z) = \lambda_c^2(z) \omega(z), \tag{24}$$

где $\omega(z) = 1 + 3cz^2 \lambda_c(z)$.

Применяя принцип аргумента из теории аналитических функций [23], убеждаемся, что $\omega(z)$ имеет два действительных нуля $\pm\eta_0$, причем согласно [2, с. 358–359] $\eta_0 = 1 + \varepsilon$, где $\varepsilon \approx 10^{-8}$. Разлагая $\lambda(z)$ в ряд в окрестности точки $z = \infty$, можно увидеть, что эта точка является нулем четвертого порядка. Следовательно, дискретный спектр характеристического уравнения как множество нулей дисперсионной функции состоит из 4-кратной точки $z = \infty$ и двух точек $\pm\eta_0$. Этим нулям отвечают шесть дискретных решений уравнения (18):

$$h^{(1)}(x, \mu) = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad h^{(2)}(x, \mu) = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad h^{(i)}(x, \mu) = (x - \mu) h^{(i-2)}(x, \mu), \quad i = 3, 4,$$

$$h_{\pm\eta_0}(x, \mu) = \frac{1}{2} \frac{\pm\eta_0 K(\pm\mu\eta_0)}{\pm\eta_0 - \mu} \exp\left(-\frac{x}{\pm\eta_0}\right) n(\pm\eta_0).$$

Подставляя $h_{\eta_0}(x, \mu)$ в уравнение (18), находим, что вектор $n(\eta_0)$ удовлетворяет однородному уравнению

$$\Lambda(\eta_0) n(\eta_0) = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \tag{25}$$

причем $\Lambda(\eta_0) = 0$. Векторное уравнение (25) эквивалентно трем скалярным, из которых находим, что

$$n(\eta_0) = \begin{bmatrix} 4\alpha\eta_0 t(\eta_0) \\ -\lambda_c(\eta_0) \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Покажем, что решение задачи (18)–(20) можно представить в виде разложения по собственным векторам (решениям)

$$h(x,\mu) = A_0 h_{\eta_0}(x,\mu) + \int\limits_0^1 \exp\left(-\frac{x}{\eta}\right) F(\eta,\mu) A(\eta) d\eta. \tag{26}$$

Здесь A_0 — неизвестная постоянная, называемая коэффициентом дискретного спектра, $A(\eta)$ — неизвестная вектор-функция, называемая коэффициентом непрерывного спектра. Разложение (26) автоматически удовлетворяет условию (20). Используя условие (19), приходим к сингулярному интегральному уравнению с ядром Коши:

$$\frac{1}{2}\int\limits_0^1 \eta K(\mu\eta) A(\eta) \frac{d\eta}{\eta-\mu} + \Lambda(\mu)A(\mu) + A_0 h_{\eta_0}(0,\mu) + h_{as}(0,\mu) = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad 0 < \mu < 1. \tag{27}$$

Введем вспомогательную вектор-функцию

$$N(z) = \frac{1}{2}\int\limits_0^1 \eta K(z\eta) A(\eta) \frac{d\eta}{\eta - z}, \tag{28}$$

для которой ее граничные значения на разрезе $(0, 1)$ сверху и снизу связаны формулами Сохоцкого–Племеля

$$N^+(\mu) - N^-(\mu) = \pi i \mu K(\mu^2) A(\mu), \quad N^+(\mu) + N^-(\mu) = \int\limits_0^1 \eta K(\mu\eta) A(\eta) \frac{d\eta}{\eta-\mu}, 0 < \mu < 1.$$

Приведем такие же формулы для дисперсионной матрицы-функции

$$\Lambda^+(\mu) - \Lambda^-(\mu) = \pi i \mu K(\mu^2), \quad \Lambda^+(\mu) + \Lambda^-(\mu) = 2\Lambda(\mu).$$

С помощью последних равенств приведем уравнение (27) к векторной краевой задаче Римана–Гильберта:

$$L^+(\mu)\left[N^+(\mu) + A_0 h_{\eta_0}(0,\mu) + h_{as}(0,\mu)\right] = L^-(\mu) \times$$
$$\times \left[N^-(\mu) + A_0 h_{\eta_0}(0,\mu) + h_{as}(0,\mu)\right], \quad 0 < \mu < 1, \tag{29}$$

с матричным коэффициентом

$$G(\mu) = \left[L^+(\mu)\right]^{-1} L^-(\mu) = K(\mu^2)(\Lambda^+(\mu))^{-1}\Lambda^-(\mu)K^{-1}(\mu^2).$$

Здесь $L(z) = K(z^2)\Lambda(z)K^{-1}(z^2)$. Рассмотрим задачу факторизации коэффициента $G(\mu)$:

$$G(\mu) = X^+(\mu)\left[X^-(\mu)\right]^{-1}, \qquad 0 < \mu < 1. \tag{30}$$

Здесь $X(z)$ — неизвестная матрица-функция, аналитическая в комплексной плоскости с разрезом вдоль отрезка $[0, 1]$. Задача (30) является однородной задачей, отвечающей неоднородной задаче (29). Метод решения задачи (30) был разработан авторами в [17], поэтому ее решение приведем без вывода:

$$X(z) = \begin{bmatrix} U(z) & 4\alpha(U(z) - V(z)) & 0 \\ 0 & V(z) & 0 \\ 0 & 0 & U(z) \end{bmatrix}.$$

В этой матрице

$$U(z) = z\exp\left(-u(z)\right), \quad u(z) = \frac{1}{\pi}\int\limits_0^1 [\theta(\tau) - \pi]\frac{d\tau}{\tau - z}, \quad \theta(\tau) = \arg\lambda_c^+(\tau),$$

$$V(z) = z\exp\left(-v(z)\right), \quad v(z) = \frac{1}{\pi}\int\limits_0^1 [\varepsilon(\tau - \pi)]\frac{d\tau}{\tau - z}, \quad \varepsilon(\tau) = \arg\omega^+(\tau),$$

причем $\theta(\tau)$ и $\varepsilon(\tau)$ — непрерывные ветви аргументов соответственно функций $\lambda_c^+(\tau)$ и $\omega^+(\tau)$, выделяемые условием $\theta(0) = 0$ и $\varepsilon(0) = 0$. Найдем асимптотику функций $U(z)$ и $V(z)$ в окрестности бесконечно удаленной точки:

$$U(z) = z - U_1 + o(1), \quad |z| \to \infty; \quad V(z) = z - V_1 + o(1), \quad |z| \to \infty.$$

Здесь

$$U_1 = -\frac{1}{\pi}\int\limits_0^1 [\theta(\tau) - \pi]\,d\tau, \qquad V_1 = -\frac{1}{\pi}\int\limits_0^1 [\varepsilon(\tau) - \pi]\,d\tau$$

суть лорановские коэффициенты при z^{-1} разложений функций $U(z)$ и $V(z)$ в окрестности бесконечно удаленной точки. Формула для U_1 интегрированием по частям приводится к известной формуле (4.21) (см. [2, с. 334])

$$U_1 = \frac{1}{2}\int\limits_0^1 \frac{d\tau}{(1 - \tau^2)\left[\lambda_c^2(\tau) + (\pi\tau/2)^2\right]}.$$

Следовательно, асимптотика матрицы $X(z)$ в окрестности бесконечно удаленной точки такова:

$$X(z) = zE - \begin{bmatrix} U_1 & 4\alpha(U_1 - V_1) & 0 \\ 0 & V_1 & 0 \\ 0 & 0 & U_1 \end{bmatrix} + o(1), \qquad |z| \to \infty.$$

Вернемся к решению неоднородной задачи (29). С помощью (30) преобразуем (29) к задаче определения аналитической вектор-функции $N(z)$ по нулевому скачку:

$$[X^+(\mu)]^{-1}[N^+(\mu) + A_0 h_{\eta_0}(0,\mu) + h_{as}(0,\mu)] =$$
$$= [X^-(\mu)]^{-1}[N^-(\mu) + A_0 h_{\eta_0}(0,\mu) + h_{as}(0,\mu)], \quad 0 < \mu < 1. \tag{31}$$

Учитывая поведение векторов и матриц, входящих в задачу (31), и их асимптотику в бесконечно удаленной точке, получаем ее общее решение:

$$N(z) = -h_{as}(0,z) - A_0 h_{\eta_0}(0,z) + X(z)\left[\frac{1}{z-\eta_0}B + C\right], \tag{32}$$

где B и C — произвольные векторы с элементами b_i и c_i ($i = 1,2,3$).

Решение (32) имеет простые полюсы в точке η_0 и в точке $z = \infty$, в то время как вектор-функция $N(z)$, введенная ранее равенством (28), в точке η_0 является аналитической, а в точке $z = \infty$ исчезает ее первый (верхний) и третий (нижний) элемент, а второй элемент имеет конечный предел. Для устранения указанных особенностей перейдем к условиям разрешимости и воспользуемся наличием свободных параметров решения (32). Для этого запишем решение (32) в явном виде:

$$\begin{bmatrix} N_1(z) \\ N_2(z) \\ N_3(z) \end{bmatrix} = -\begin{bmatrix} \varepsilon_n + \varepsilon_T/2 + Kz/2 \\ \left(2U - 2K/3\sqrt{\pi}\right) z \\ \varepsilon_n - 11\varepsilon_T/2 + 13Kz/2 \end{bmatrix} - \frac{1}{2}\frac{A_0}{\eta_0 - z}\begin{bmatrix} -4\alpha\eta_0 \\ z \\ 0 \end{bmatrix} +$$
$$= \begin{bmatrix} U(z) & 4\alpha(U(z)-V(z)) & 0 \\ 0 & V(z) & 0 \\ 0 & 0 & U(z) \end{bmatrix}\left\{\frac{1}{z-\eta_0}\begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{bmatrix}\right\}. \tag{33}$$

Из выражений (32) и (33) видно, что полюс в точке η_0 устраняется одним векторным условием

$$\frac{1}{2}A_0\eta_0 K(\eta_0^2)n(\eta_0) + X(\eta_0)B = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix},$$

эквивалентным трем скалярным условиям:

$$U(\eta_0)b_1 + 4\alpha(U(\eta_0) - V(\eta_0))b_3 = 2\alpha\eta_0 A_0, \quad V(\eta_0)b_2 = -\frac{1}{2}A_0\eta_0, \quad b_3 = 0.$$

Из этих уравнений построим вектор B:

$$B = \frac{1}{2}\frac{\eta_0 A_0}{V(\eta_0)}\begin{bmatrix} 4\alpha \\ -1 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Полюс в точке $z = \infty$ устраним условиями:

$$c_1 = \frac{1}{2}K, \quad c_2 = 2U - \frac{2K}{3\sqrt{\pi}}, \quad c_3 = \frac{15}{2}K.$$

Приравняем свободные члены в разложениях общего решения и вспомогательной функции $N(z)$, введенной равенством (28). Получим систему из трех уравнений:

$$\varepsilon_n + \frac{1}{2}\varepsilon_T = b_1 - c_1 U_1 - 4\alpha(U_1 - V_1)c_2, \tag{34}$$

$$\frac{3c}{2}\int_0^1 \eta^2 A_2(\eta)d\eta = -\frac{1}{2}A_0 - b_2 + c_2V_1, \tag{35}$$

$$\varepsilon_n - \frac{13}{2}\varepsilon_T = -c_3U_1. \tag{36}$$

Для вычисления интеграла из (35) возьмем функцию $N_2(z)$ из равенства (28):

$$N_2(z) = \frac{3c}{2}z\int_0^1 \eta^2 A_2(\eta)\frac{d\eta}{\eta - z}$$

и из общего решения (33):

$$N_2(z) = -\left(2U - \frac{2K}{3\sqrt{\pi}}\right)z - \frac{1}{2}\frac{A_0 z}{\eta_0 - z} + V(z)\left(\frac{b_2}{z-\eta_0} + c_2\right).$$

Из формулы Сохоцкого–Племеля для $N_2(z)$ и последних равенств находим, что

$$\frac{3c}{2}\int_0^1 \eta^2 A_2(\eta)d\eta = \frac{1}{2\pi i}\int_0^1 \left[V^+(\eta) - V^-(\eta)\right]\left(\frac{b_2}{\eta - \eta_0} + c_2\right)\frac{d\eta}{\eta}.$$

Для вычисления этого интеграла воспользуемся методами контурного интегрирования, взяв сложный контур, охватывающий разрез $[0,1]$ и бесконечно удаленную точку. Опуская доказательства, приводим

$$\frac{3c}{2}\int_0^1 \eta^2 A(\eta)d\eta = \frac{b_2}{\eta_0}\frac{1}{2\pi i}\int_0^1 \left[V^+(\eta) - V^-(\eta)\right]\frac{d\eta}{\eta-\eta_0} + \left(c_2 - \frac{b_2}{\eta_0}\right)\frac{1}{2\pi i}\times$$

$$\times\int_0^1 \left[V^+(\eta) - V^-(\eta)\right]\frac{d\eta}{\eta} = \frac{b_2}{\eta_0}(V(\eta_0) - \eta_0 + V_1) +$$

$$+\left(c_2 - \frac{b_2}{\eta_0}\right)(V(0) + V_1) = \frac{b_2}{\eta_0}(V(\eta_0) - \eta_0 - V(0)) + c_2(V(0) + V_1).$$

Подставляя значение этого интеграла в равенство (35), получаем:

$$\frac{b_2}{\eta_0}(V(\eta_0) - V(0)) + c_2V(0) = -\frac{1}{2}A_0,$$

откуда

$$A_0 = -2c_2V(\eta_0) = -2\left(2U - \frac{2K}{3\sqrt{\pi}}\right)V(\eta_0),$$

следовательно,

$$b_1 = -4\alpha\eta_0 c_2 = -4\alpha\eta_0\left(2U - \frac{2K}{3\sqrt{\pi}}\right).$$

Из уравнений (34) и (36) находим:

$$\varepsilon_T = KU_1 - \frac{2\alpha}{3}\left(2U - \frac{2K}{3\sqrt{\pi}}\right)(U_1 - V_1 + \eta_0),$$

$$\varepsilon_n = \frac{11}{2}\varepsilon_T - \frac{13}{2}KU_1,$$

или, обозначив $\beta = -2\alpha(U_1 - V_1 + \eta_0)/3$, имеем $\varepsilon_T = 2U\beta + K(U_1 - 2\beta/3\sqrt{\pi})$ и $\varepsilon_n = 2U(11\beta/2) + K(-U_1 - 11\beta/3\sqrt{\pi})$. Учитывая численные расчеты ($U_1 = 0.71045$ и $V_1 = 0.98340$), приведем окончательные формулы для вычисления скачка температуры и скачка концентрации: $\varepsilon_T = 2U(-0.16330) + K(0.77187)$ и $\varepsilon_n = 2U(-0.89815)+$ $+K(-0.37263)$.

3. МНОГОАТОМНЫЙ ГАЗ

Рассмотрим граничную задачу (10)–(12) для многоатомного газа, т.е. положим в этих уравнениях $r = 2$. Получим граничную задачу, состоящую в решении кинетического уравнения

$$\mu\frac{\partial\varphi}{\partial x} + \varphi(x,\mu,\xi,\omega) =$$
$$= \frac{4}{\sqrt{\pi}}\int\limits_{-1}^{1}\int\limits_{0}^{\infty}\int\limits_{0}^{\infty}\exp(-\xi'^2 - \omega'^2)k(\mu,\xi,\omega;\mu',\xi',\omega')\varphi(x,\mu',\xi',\omega')d\mu'd\xi'd\omega' \qquad (37)$$

с граничными условиями

$$\varphi(0,\mu,\xi,\omega) = 0, \qquad 0 < \mu < 1, \qquad (38)$$

$$\varphi(x,\mu,\xi,\omega) = \varphi_{as}(x,\mu,\xi,\omega) + o(1), \quad x \to \infty, \quad -1 < \mu < 0. \qquad (39)$$

Здесь

$$k(\mu,\xi,\omega;\mu'\xi',\omega') = 1 + \frac{3}{2}\mu\xi\mu'\xi' + \frac{2}{7}\left(\xi^2 + \omega^2 - \frac{7}{2}\right)\left(\xi'^2 + \omega'^2 - \frac{7}{2}\right)$$

— ядро уравнения (37),

$$\varphi_{as}(x,\mu,\xi,\omega) = \varepsilon_n + \varepsilon_T(\xi^2 + \omega^2 - 3) + \left(2U - \frac{2K}{3\sqrt{\pi}}\right)\mu\xi + K(x-\mu)(\xi^2 + \omega^2 - 4)$$

— асимптотическая часть функции распределения.

Разложим функцию φ по трем ортогональным направлениям:

$$\varphi = h_1(x,\mu) + \xi h_2(x,\mu) + \left(\xi^2 + \omega^2 - \frac{7}{2}\right)h_3(x,\mu) + \varphi_{as}(x,\mu,\xi,\omega).$$

Здесь ортогональность понимается как равенство нулю следующего скалярного произведения:

$$(f,g) = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \int_{-1}^{1} \int_{0}^{\infty} \int_{0}^{\infty} \exp(-\xi^2 - \omega^2)\xi^3\omega^2 f(\mu,\xi,\omega)g(\mu,\xi,\omega)d\mu d\xi d\omega.$$

Подставляя разложение φ в уравнение (37), получаем следующую систему кинетических уравнений:

$$\mu\frac{h_1}{\partial x} + h_1 = (1,h_1) + 4\alpha(1,h_2), \tag{40}$$

$$\mu\frac{\partial h_2}{\partial x} + h_2 = 3\mu\left[2\alpha(\mu',h_1) + (\mu',h_2) + \alpha(\mu',h_3)\right], \tag{41}$$

$$\mu\frac{\partial h_3}{\partial x} + h_3 = \frac{4}{7}\alpha(1,h_2) + (1,h_3), \tag{42}$$

где по-прежнему $\alpha = 3\sqrt{\pi}/16$.

Упрощению системы (40)–(42) послужат два закона сохранения — числа частиц и энергии:

$$\int \exp(-\xi^2 - \omega^2)\xi^3\omega^2\mu\varphi(x,\mu,\xi,\omega)d\mu d\xi d\omega = 0$$

и

$$\int \exp(-\xi^2 - \omega^2)\xi^3\omega^2(\xi^2+\omega^2)\mu\varphi(x,\mu,\xi,\omega)d\mu d\xi d\omega = 0.$$

Подставляя разложение функции φ в эти равенства, получаем два уравнения, из которых находим, что $(\mu',h_1) = -4\alpha(\mu',h_2)$, $(\mu',h_3) = -(4/7)\alpha(\mu',h_2)$. Следовательно, уравнение (41) упрощается:

$$\mu\frac{\partial h_2}{\partial x} + h_2 = 3c\mu(\mu',h_2),$$

где $c = 1 - 135\pi/448$. Сделаем линейную замену, аналогичную случаю двухатомного газа: $h_1 - 7h_3 \to h_3$. В результате вместо (42) получаем следующее уравнение:

$$\mu\frac{\partial h_3}{\partial x} + h_3 = (1,h_3).$$

Полученную систему кинетических уравнений запишем в векторном виде:

$$\mu\frac{\partial h}{\partial x} + h(x,\mu) = \frac{1}{2}\int_{-1}^{1} K(\mu,\mu')h(x,\mu')d\mu', \tag{43}$$

где h — вектор-столбец с элементами $h_1, h_2, h_3, K(\mu,\mu')$ — та же матрица, что и в разд. 2. Граничные условия теперь имеют следующий вид:

$$h(0,\mu) = -h_{as}(0,\mu), \qquad 0 < \mu < 1, \tag{44}$$

$$h(\infty,\mu)=\begin{bmatrix}0\\0\\0\end{bmatrix},\qquad -1<\mu<0, \tag{45}$$

где

$$h_{as}(x,\mu)=\begin{bmatrix}\varepsilon_n+\varepsilon_T/2-K(x-\mu)/2\\ \left(2U-2K/3\sqrt{\pi}\right)\mu\\ \varepsilon_n-13\varepsilon_T/2-15K(x-\mu)/2\end{bmatrix}.$$

Задача (43)–(45) по своей форме в точности совпадает с рассмотренной задачей (18)–(20). Поэтому без вывода приведем формулы для скачка температуры и концентрации:

$$\varepsilon_T=2U\beta+K(U_1-2\beta/3\sqrt{\pi}),\qquad \varepsilon_n=2U(13\beta/2)+K(-U_1-13\beta/3\sqrt{\pi}).$$

Здесь $\beta=-4\alpha(U_1-V_1+\eta_0)/7$, η_0 — нуль функции $\omega(\eta)=1+3cz^2\lambda_c(z)$. Учитывая численные расчеты ($V_1=0.97915$, $U_1=0.71045$), приведем окончательные формулы для скачка температуры и скачка плотности:

$$\varepsilon_T=2U(-0.13888)+K(0.76269)\quad\text{и}\quad \varepsilon_n=2U(-0.90272)+K(-0.37092).$$

Полученные результаты, а также результаты для одноатомного газа из нашей работы [11] приведем в виде таблицы.

Таблица

Задача	Коэффициент	Одноатомный газ	Двухатомный газ	Многоатомный газ
Задача Смолуховского	c_t	0.79954	0.77187	0.76269
	c_n	−0.39863	−0.37263	−0.37092
Задача о слабом испарении	s_t	−0.23687	−0.16330	−0.13888
	s_n	−0.82905	−0.89815	−0.90272

Отметим, что в наиболее важной с точки зрения приложений задаче Смолуховского о скачке температуры граничное условие принято записывать в виде [1, 2] $T_e-T_s=C_TlA$. Здесь величина l имеет смысл длины свободного пробега. Эта величина определяется различными авторами по-разному. Будем пользоваться определением, совпадающим в случае одноатомного газа с определением Черчиньяни [2] $l=\Pr\chi\sqrt{\pi m/2kT}$, где χ — коэффициент температуропроводности, Pr — число Прандтля. Тогда для $\Pr=2/3$ величины C_T равны: $C_T=1.99885$ для одноатомного газа, $C_T=1.86763$ для двухатомного газа, $C_T=1.82963$ для многоатомного газа. Из этих результатов видно, что при переходе от одноатомного газа к двухатомному скачок температуры уменьшается на 6.6%, а при переходе от двухатомного газа к многоатомному — на 2.0%. Замедление скорости изменения скачка температуры связано с тем, что при переходе от одноатомного газа к двухатомному число степеней свободы молекулы изменяется на 67% (от 3 до 5), а при переходе от двухатомного газа к многоатомному — только на 20% (от 5 до 6).

В заключение отметим, что в данной работе впервые с использованием единого аналитического подхода решена фундаментальная задача Смолуховского для молекулярных газов с различным числом атомов в молекуле, а также решена задача о слабом испарении. Обе задачи рассмотрены в единой постановке.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 97-01-00333).

Литература

1. М. Н. Коган, *Динамика разреженного газа*, Наука, Москва (1967).
2. К. Черчиньяни, *Теория и приложения уравнения Больцмана*, Мир, Москва (1978).
3. А. В. Латышев, ПММ **54**, 581 (1990).
4. E. P. Gross, E. A. Jackson, and S. Ziering, Ann. Phys. **1**, 141 (1957).
5. Ю. Ю. Абрамов, ТВТ **8**, 1013 (1970).
6. Е. Г. Маясов, А. А. Юшканов, Ю. И. Яламов, Письма в ЖТФ **14**, 498 (1988).
7. S. K. Loyalka, Physica A **163**, 213 (1990).
8. Y. Sone and Y. Onishi, J. Phys. Soc. Jap. **35**, 1773 (1973).
9. Y. Onishi and Y. Sone, J. Phys. Soc. Jap. **44**, 1981 (1978).
10. Е. Б. Долгошеина, А. В. Латышев, А. А. Юшканов, Изв. РАН, Сер. МЖГ № 1, 163 (1992).
11. А. В. Латышев, А. А. Юшканов, Изв. РАН, Сер. МЖГ № 3, 140 (1996).
12. В. М. Жданов, М. Я. Алиевский, *Процессы переноса и релаксации в молекулярных газах*, Наука, Москва (1989).
13. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика*, Наука, Москва (1964).
14. В. А. Рыков, Изв. АН СССР, Сер. МЖГ № 6, 105 (1975).
15. И. Н. Ларина, В. А. Рыков, в сб. *Численные методы в динамике разреженных газов*, Вып. 4, Изд-во ВЦ АН СССР, Москва (1979), с. 52.
16. K. Barwinkel, U. Thelker, in *20th Intern. Symp. of Rarefied Gas Dynamics*, 1996 Book of Abstracts, H. 3, Beiging (1996).
17. А. В. Латышев, А. А. Юшканов, ТМФ **95**, 530 (1993).
18. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Механика*, Наука, Москва (1988).
19. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Гидромеханика*, Наука, Москва (1986).
20. И. Н. Ларина, В. А. Рыков, Изв. АН СССР, Сер. МЖГ № 5, 141 (1986).
21. В. С. Владимиров, *Обобщенные функции в математической физике*, Наука, Москва (1976).
22. К. Кейз, П. Цвайфель, *Линейная теория переноса*, Мир, Москва (1972).
23. Ф. Д. Гахов, *Краевые задачи*, Наука, Москва (1977).