Краткие сообщения по физике № 2-1989 г.

УДК 536. 75

КИНЕТИЧЕСКОЕ УРАВНЕНИЕ ДЛЯ УМЕРЕННО ПЛОТНОГО ГАЗА ИЗ МОЛЕКУЛ С ТВЕРДОЙ СЕРДЦЕВИНОЙ

В.И. Курочкин

На основе анализа цепочки уравнений ББГКИ получено кинетическое уравнение, обобщающее уравнение Энскога на случай молекул, потенциал взаимодействия которых состоит из суммы потенциала твердых сфер и "хвоста", учитывающего мягкое взаимодействие.

Первая успешная попытка построения кинетической теории плотных газов была сделана Энскогом /1/, где с помощью интуитивных соображений была обобщена кинетическая теория газов нормальной плотности, но только для случая твердых сферических молекул. В дальнейшем Боголюбовым был разработан последовательный метод построения кинетических уравнений для плотных газов, исходя из уравнения Лиувилля. Метод Боголюбова получил дальнейшее развитие в работах /2/, где при условии полного ослабления начальных корреляций получено обобщенное уравнение Больцмана с учетом тройных столкновений. Однако обобщенные кинетические уравнения, выведенные из уравнения Лиувилля, содержат операторы многочастичного рассеяния, что принципиально не позволяет разрешить их в общем случае. По этой причине не ослабевает интерес к модельным кинетическим уравнениям, позволяющим решить задачу до конца.

Данная работа посвящена обобщению модели Энскога, хорошо зарекомендовавшей себя при численных расчетах коэффициентов переноса, на случай потенциалов взаимодействия типа $\varphi(r) = \bar{\varphi}(r) + \widetilde{\varphi}(r)$, где $\bar{\varphi}(r)$ – потенциал твердых сфер радиуса σ; $\widetilde{\varphi}(r)$ – "хвост" потенциала взаимодействия, относительно которого предполагается, что $\epsilon = \max|\widetilde{\varphi}(r)|/kT \ll 1$.

Динамика s – частичных функций распределения (ФР) описывается системой уравнений ББГКИ /2/:

$$(\partial_t + \sum_i v_i \nabla_i - \frac{1}{m}\sum_{i<j} \nabla_i \varphi_{ij} \partial_{ij}) F_s(x_1 \ldots x_s, t) = \sum_i \frac{1}{m} \int \nabla_i \varphi_{i,\, s+1} \partial_i F_{s+1}(x_1 \ldots x_{s+1}, t)\, dx_{s+1}, \tag{1}$$

где v_i – скорость i-й частицы; $x_i = (r_i, v_i)$; $\partial_t = \partial/\partial t$; $\nabla_i = \partial/\partial r_i$, $\partial_i = \partial/\partial v_i$; $\partial_{ij} = \partial_i - \partial_j$; $\varphi_{ij} = \varphi(r_{ij})$; $r_{ij} = |\mathbf{r}_{ij}|$; $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$.

Представим s-частичную ФР в виде ряда по параметру взаимодействия ϵ: $F_s = \bar{F}_s + \epsilon \widetilde{F}_s + O(\epsilon^2)$, где $\bar{F}_s$ – s-частичная ФР для твердых сфер, $\widetilde{F}_s$ – добавка, учитывающая взаимодействие частиц на расстоянии $r > \sigma$. Подставляя это разложение в уравнение (2) при $s = 2$ в нулевом и первом порядках по ϵ, получим выражения:

$$(\partial_t + \sum_{i=1}^{2} v_i \nabla_i - \frac{1}{m} \nabla_1 \bar{\varphi}_{12} \partial_{12}) \bar{F}_2 = \sum_{i=1}^{2} \frac{1}{m} \int \nabla_i \bar{\varphi}_{i3} \partial_i \bar{F}_3\, dx_3, \tag{2}$$

$$(\partial_t + \sum_{i=1}^{2} v_i \nabla_i - \frac{1}{m} \nabla_1 \bar{\varphi}_{12} \partial_{12}) \widetilde{F}_2 - \frac{1}{m} \nabla_1 \widetilde{\varphi}_{12} \partial_{12} \bar{F}_2 = \sum_{i=1}^{2} \frac{1}{m} \int [\nabla_i \bar{\varphi}_{i3} \partial_i \widetilde{F}_3 + \nabla_i \widetilde{\varphi}_{i3} \partial_i \bar{F}_3]\, dx_3. \tag{3}$$

Уравнение для одночастичной ФР запишем в виде

$$(\partial_t + v_1 \nabla_1) F(x_1, t) = \frac{1}{m} \int \nabla_1 \bar{\varphi}_{12} \partial_1 F_2(x_1 x_2, t)\, dx_2 + \frac{1}{m} \int \nabla_1 \widetilde{\varphi}_{12} \partial_1 F_2(x_1 x_2, t)\, dx_2. \tag{4}$$

Точного аналитического решения уравнения (2) не известно. Однако существует его приближенное решение, приводящее к уравнению Энскога /3/: $\bar{F}_2(x_1 x_2, t) = \kappa(r_1 r_2)\, F(x_1, t) F(x_2, t)$, где $\kappa(r_1, r_2)$ –

— парная корреляционная функция, хорошо известная в равновесной статистической механике. В первом приближении по параметру плотности $\mu = n\sigma^3$ она может быть записана в форме /3/:

$$\kappa(r_1\ r_2) = 1 + \int n(r_3)\left[\exp\left(-\frac{\varphi_{13}}{kT}\right) - 1\right]\left[\exp\left(-\frac{\varphi_{23}}{kT}\right) - 1\right] dr_3, \tag{5}$$

где n — плотность числа частиц.

Чтобы получить замкнутое кинетическое уравнение, необходимо также найти решение уравнения (3). Если левая часть его имеет порядок по плотности μ^k, то правая имеет порядок μ^{k+1}. Это дает основание пренебречь правой частью уравнения (3) и решение его при условии ослабления корреляций при $r_{21} \to \infty$ имеет вид $\widetilde{F}_2(x_1 x_2) = \vec{\Delta}\partial_{12}\bar{F}_2(x_1 x_2) + O(\mu^{k+1})$. Здесь $\vec{\Delta} = m^{-1}\int\limits_0^{-\infty}\nabla_1\varphi(g\tau - q)\,d\tau$, $g = v_2 - v_1$, $q = r_{21}$. Введем систему координат Oxyz с центром в точке r_1 и осью Oz вдоль направления вектора g. Ось Ox лежит в плоскости траектории частицы 2 относительно частицы 1, а ось Oy дополняет систему до правой тройки. В данной системе выражение для $\vec{\Delta}$ принимает вид

$$\vec{\Delta} = \vec{\Delta}(z, b) = \frac{1}{m}\int\limits_{-\infty}^{z}\varphi'(R)\frac{R}{gR}d\eta, \qquad R = \eta e + bj, \tag{6}$$

где $e = g/g$; b — прицельное расстояние; j — единичный вектор вдоль оси Ox. Для двухчастичной ФР соответственно имеем : $F_2(x_1\ x_2) = (1 + \vec{\Delta}\partial_{12})\bar{F}_2(x_1 x_2) \cong \bar{F}_2(r_1, W_1; r_2, W_2)$, где $W_1 = V_1 + \vec{\Delta}$, $W_2 = V_2 - \vec{\Delta}$ скорости частиц вдоль траектории движения.

Осуществляя разложение ФР F_2 в ряд Тейлора вблизи точки $r = r_1$, получим

$$F_2(x_1 x_2) = \kappa(q)F(W_1)F(W_2) + \kappa(q)F(W_1)q\nabla F(W_2) + \frac{1}{2}F(W_1)F(W_2)q\nabla\kappa(q) + \ldots \tag{7}$$

Здесь все функции вычисляются в точке $r = r_1$, а $\kappa(q)$ рассчитывается по формуле (5), в которой положено $n(r_3) = n(r_1)$.

Подстановка выражения (7) в уравнение (4) дает замкнутое кинетическое уравнение в форме

$$(\partial_t + V_1\nabla_1 + G\partial_1)F(x_1, t) = I_1 + I_2 \tag{8}$$

где $G = -\frac{1}{\rho}\nabla U$, $U = \frac{2\pi n^2}{3}\int\limits_\sigma^\infty\widetilde{\varphi}'(q)\kappa(q)\,q^3 dq$, $\rho = nm$,

$$I_1 = \int\int\kappa(q)\nabla_1\varphi_{12}\ \partial_1 F(W_1)F(W_2)\,dq\,dv_2, \tag{9}$$

$$I_2 = \int\int\nabla_1\bar{\varphi}_{12}\partial_1\left\{F(W_1)q\left[\kappa(q)\nabla F(W_2) + \frac{1}{2}F(W_2)\nabla\kappa(q)\right]\right\}dq\,dv_2.$$

Поскольку W_1 и W_2 есть скорости частиц вдоль траектории движения, интеграл I_1 может быть преобразован к виду

$$I_1 = \int\int\kappa(q)\,g(\partial/\partial z)[F(v_1)F(v_2) + \vec{\Delta}(z, b)\partial_{12}F(v_1)F(v_2)]\ dz\,b\,db\,d\epsilon\,dv_2,$$

где ϵ — азимутальный угол цилиндрической системы координат (z, b, ϵ). Можно осуществить интегрирование по z, при этом необходимо учесть, что при $qg > 0$, т. е. для разлетающихся частиц скорости v_1 и v_2 необходимо заменить на v_1' и v_2', которые представляют собой скорости частиц после столкновения в динамике твердых шаров. После интегрирования получим $I_1 = I_b + [\kappa(\sigma) - 1]\bar{I}_b$, где I_b — интеграл столкновений Больцмана для частиц с полным потенциалом $\varphi = \bar{\varphi} + \widetilde{\varphi}$, а $\bar{I}_b$ — интеграл столкновений Больцмана для твердых сфер

Таким образом, уравнение (8) с учетом выражений (6) и (9) представляет собой кинетическое уравнение для умеренно плотного газа из молекул с твердой сердцевиной. В частном случае $\widetilde{\varphi} = 0$ оно сводится к уравнению Энскога. Решение уравнения (8) может быть проведено до конца и результаты расчетов позволят более полно учесть температурную зависимость коэффициентов переноса при высоких плотностях.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ферцигер Дж., Капер Г. Математическая теория неоднородных газов. М., Мир, 1976.
2. Уленбек Дж., Форд Дж. Лекции по статистической механике. М., Мир, 1965.
3. Курочкин В. В. В сб. Аэродинамика в технологических процессах. М., Наука, 1981.

Поступила в редакцию 25 августа 1988 г.