

Лекции (15 часов)

Модуль 1. Введение и основные соотношения в приближении локального равновесия
Лекция 1. Введение. Предмет курса – необратимые процессы в газах. Метод – статистический. Краткий исторический обзор развития кинетической теории. Характеристика литературных источников по списку основной и дополнительной литературы. Феноменологическое и кинетическое описание процессов переноса. Конститутивные соотношения. Системы различных характеристических скоростей (системы отсчета).

6 часа

Лекция 2. Межмолекулярные силы. Динамические соотношения при столкновениях частиц в трехмерном случае. Частота столкновений, длина свободного пробега, учет персистенции скоростей при столкновениях. Число Кнудсена как характеристика режимов течений в газах.

5 часа

Лекция 3. Способы описания молекулярных систем. Динамическое и статистическое описание систем, состоящих из большого числа частиц. Функции распределения молекул по скоростям как плотность вероятности в пространстве скоростей (импульсов). Моменты, их физический смысл.

Газ Кнудсена. Эффузия. Термотранспирация.

4 часа

Семинары (15 часов)

Модуль 1. Строгая кинетическая теория как теория, основанная на решении кинетического уравнения

Семинар 1. Кинетические уравнения. Уравнение Больцмана. Способы получения уравнения Больцмана. Другие кинетические уравнения. Общее уравнение переноса Энскога. H -теорема Больцмана.

2 часа

Семинар 2. Решение уравнения Больцмана для однородного стационарного состояния. Локально-максвелловская функция распределения в чистом газе и в смесях.. Решение уравнения Больцмана методом Энскога-Чепмена. Однокомпонентный неоднородный газ. Общая схема решения с применением разложения по полиномам Сонина-Лагерра. Вязкость. Теплопроводность

2 часа

Семинар 3. Решение уравнения Больцмана методом Энскога-Чепмена для двухкомпонентной смеси. Диффузия. Термодиффузия. Бародиффузия. Распространение результатов решения на случай многокомпонентных смесей.

Моментный метод решения уравнений Больцмана (метод Грэда). Представление неравновесной функции распределения в виде разложения по полиномам Эрмита-Чебышева. Выражения для потоков и коэффициентов переноса. Вывод неравновесной функции распределения в модели последовательных локально-равновесных состояний.

3 часа

Модуль 2. Получение выражений для потоков и коэффициентов переноса в методе последовательных локально-равновесных состояний. Сопоставление результатов теории с экспериментом и результатов решения различными методами решения уравнения Больцмана.

Семинар 4. Вывод балансового соотношения для локальной объемной плотности энтропии. Выражение для локального производства энтропии в кинетической теории.

2 часа

Семинар 5 Кинетическая теория плотных газов и граничные эффекты
Газовые смеси умеренной плотности. Теория Энскога.
Необратимые процессы в кластерной модели газового состояния.

2 часа

Семинар 6. Явления на границе газ - твердая стенка. Коэффициенты аккомодации. Кинетические граничные условия. Скольжения. О новых явлениях в неоднородных газах. Современное состояние развития кинетической теории. Проблема необратимости в кинетической теории.

4 часа

Всего по курсу 30 часов:

Литература

Основная литература

1. Больцман Л. Лекции по теории газов. -М.:ГИТТЛ,1956. -555с.
2. Чепмен С., Каулинг Т. Математическая теория неоднородных газов. -М.:ИЛ,1960.-510с.
3. Гиршфельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей. - М.:ИЛ,1961.-930с.
4. Ферцигер Дж., Капер Г. Математическая теория процессов переноса в газах. - М.:Мир,1976.-556с.
5. Боголюбов Н.Н. Проблемы динамической теории в статистической физике. -М.-Л.: ОГИЗ, 1946.-119с.
6. Силин В.П. Введение в кинетическую теорию газов. -М.: Наука,1971.-332с.
7. Коган М.Н. Динамика разреженного газа. -М.: Наука,1967. -440 с.
8. Алексеев Б.В. Математическая кинетика реагирующих газов. -М.: Наука,1982.-424с.
9. Либов Р. Введение в теорию кинетических уравнений. -М.:Мир,1974.-372с.
10. Хир К. Статистическая механика, кинетическая теория и стохастические процессы. – М.: Мир. 1976.
11. Курлапов Л.И. Кинетическая теория необратимых процессов в газах. Монография. – Алматы. –2000. 300 с. ISBN 9965-408-62-9.

Дополнительная литература:

1. Термодинамика газов. Пер. с англ. и нем. /Под ред.В.С. Зуева./ -М.: Машиностроение, 1970.- 414с.
2. Грэд Г. О кинетической теории разряженных газов. // Механика. Сборник сокращенных переводов иностранной литературы. -М.: ИЛ, 952, вып.4(14), с.71-97,5(15), с.61-96.
3. Кога Т. Введение в кинетическую теорию стохастических процессов в газах. М.: Наука, 1983.- 272 с.
4. Гуров К.П. Основания кинетической теории (метод Боголюбова). -М.:Наука,1966.-352с.
5. Jeans J.H. The Dynamic Theory of Gases/- Dover Publ. Inc. –4-th ed., New York: 1925.-439 p.
6. Черчиньяни К. Теория и приложения уравнения Больцмана. -М.:Мир,1978.-496с.

7. Жданов В.М. Явления переноса в многокомпонентной плазме. - М.: Энергоиздат, 1982.-176с.
8. Седов Л.И. Механика сплошной среды. Том 1 и 2. -М.: Наука, 1976.
9. Косов Н.Д. Элементарная кинетическая теория диффузии в газах. -ИФЖ, 1982, т.42, №2, с. 266-279.
10. Курлапов Л.И. Вычисление коэффициентов диффузии плотных газов. -ИФЖ, 1988, т.54, №3, с.438-442.
11. Kurlapov L.I. Irreversible processes of mass transport in gas mixtures.// Доклады Министерства науки - Академии наук Республики Казахстан. - №2. 1998, с.32-42.
12. Курлапов Л.И. Расчет равновесных свойств кластерного газа. В сб. Проблемы физики газа, плазмы и жидкости. Том 1. /Под редакцией Ф.Б. Баимбетова. - Алматы: Гылым, 1998, стр.6-16.
13. Курлапов Л.И. РАВНОВЕСНЫЕ И НЕРАВНОВЕСНЫЕ СВОЙСТВА КЛАСТЕРНЫХ ГАЗОВ Вестник КазГУ. Серия физическая. №7. Материалы Международной конференции. Физика газа, плазмы и жидкости. Алматы 1999. Стр. 99- 112.
14. Курлапов Л.И. Энтропийный анализ открытых систем.// Доклады Министерства науки и высшего образования, Национальной Академии наук Республики Казахстан, 1999, вып. 5. С.33-39.
15. Курлапов Л.И. ЖТФ, 1976, т.46, вып.8, с.1777-1780; 1978, т.48, вып.4, с.864-871; 1978, т. 48, вып.6, с.1302-1304.

Задания для самостоятельной работы

Задание 1

Получить основные соотношения, описывающие однородные и разнородные столкновения молекул.

Задание 2

Вывести формулу для времени свободного пролета молекул и средней длины свободного пролета молекул локально-равновесной многокомпонентной газовой смеси.

Задание 3

Получить уравнение Больцмана для каждого компонента трехкомпонентной смеси газов Больцмана.

Задание 4

Записать выражения для коэффициентов переноса в многокомпонентных смесях.

Задание 5

Получить балансовое соотношение и производство энтропии в смесях газов Больцмана.

Задание 6

Применить формулу для времени свободного пролета молекул для определения концентрации димеров в умеренно-плотном газе.

Литература

к разделу «Самостоятельная работа»

1. Гиршфельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей. -М.: ИЛ, 1961.-930с.
2. Ферцигер Дж., Капер Г. Математическая теория процессов переноса в газах. - М.: Мир, 1976.-556с.
3. Курлапов Л.И. Кинетическая теория необратимых процессов в газах. Монография. – Алматы. –2000. 300 с. ISBN 9965-408-62-9.

4. Курлапов Л.И., Дьяченко Е.А. Определение концентрации кластеров в газах. Вестник КазГУ. Серия физическая, №1, Алматы 2001. Стр.98-102.
5. Косов Н.Д., Курлапов Л.И. Коэффициенты изобарно-изотермической диффузии некоторых газов. -ЖТФ, 1965, т.35, вып.11, с.2120-2125.
6. Косов Н.Д., Богатырев А.Ф., Курлапов Л.И. Термодиффузионный бароэффект. - ЖТФ, 1969, т.39, №6, с.1119-1125.
7. Косов Н.Д., Богатырев А.Ф., Курлапов Л.И. Неизотермическая диффузия в газах -В кн: Тепло- и массоперенос, т.7, Минск, Наука и техника, 1968, с.507- 517.
8. Курлапов Л.И. Бародиффузионное разделение газов по теории Больцмана. -В кн: Вопросы общей и прикладной физики, Труды Первой Республиканской конференции по вопросам общей и прикладной физики, 15-19 мая, 1967, Алма-Ата, Наука, 1969, с.142-144.
9. Курлапов Л.И. К кинетической теории вязкости газов. -ЖТФ, 1978, т.48, вып.6, с.1302-1304.
10. Kurlapov L.I. The determination of transport coefficients in multicomponent gas mixtures. - in book: High Temperature Gas Dynamics (International Union of Theoretical and Applied Mechanics Symposium on High Temperature Gas Dynamics) Prague: Institute of Thermomechanics, 1983, p.78-87.
11. Курлапов Л.И. Кинетическое описание процессов переноса в инерциальной системе отсчета. ЖТФ, 1986 том 53, вып.9, с.1839.
12. Курлапов Л.И. Вычисление коэффициентов диффузии плотных газов. -ИФЖ, 1988, т.54, №3,с.438-442.
13. Kurlapov L.I. Irreversible processes of mass transport in gas mixtures.// Доклады Министерства науки - Академии наук Республики Казахстан.- №2. 1998, с.32-42.
14. Курлапов Л.И. Энтропийный анализ открытых систем.// Доклады Министерства науки и высшего образования, Национальной Академии наук Республики Казахстан, 1999, вып. 5. С.33-39.
15. Курлапов Л.И. Расчет равновесных свойств кластерного газа. В сб. Проблемы физики газа, плазмы и жидкости. Том 1. /Под редакцией Ф.Б. Баимбетова. - Алматы: Гылым, 1998, стр.6-1

3. Раздел 4

Краткий конспект лекций

Лекции

по дисциплине: «**Кинетическая теория газов**»

Автор: канд. физ.-мат.наук, доцент

Абдуает Заитович Айткожаев

Лекций 1, 2, 3, 4

Тема: Введение. Предмет курса – необратимые процессы в газах. Метод – статистический. Краткий исторический обзор развития кинетической теории. Характеристика литературных источников по списку основной и дополнительной литературы. Феноменологическое и кинетическое описание процессов переноса. Конститутивные соотношения. Системы различных характеристических скоростей (системы отсчета).

В настоящей книге излагаются основы строго кинетической теории. Строгая кинетическая теория основывается на решении кинетического уравнения, которое является интегро–дифференциальным уравнением, для которого нет общего метода решения. Даже в простых случаях с упрощениями решение является громоздким, поэтому при изучении такой теории трудно видеть физический смысл получаемых результатов. В данной книге строгая теория основана на решении линейного кинетического уравнения, и при решении используются приемы элементарной теории, которая изложена в книге [1]. Таким образом, данная книга является продолжением книги [1], и авторы надеются, что в следующей книге будет изложена более сложная теория и приведены расчеты по полученным здесь формулам. В данной книге используются термины, которые встречаются в пособиях, таких, как [2].

Кинетическая теория основывается на трех утверждения: все вещества состоят из молекул, молекулы участвуют в тепловом движении, это движение описывается уравнениями механики. Каждое из этих утверждение со временем приобретает различный смысл. Так например, в различных агрегатных состояниях структурными элементами могут быть не только молекулы: в твердых телах структурными элементами могут быть ионы, электроны. Структурные элементы, такие как ионы, или молекулы в твердом теле занимают строго определенные положения, которые чередуются и образуют кристаллическую решетку. Структурные элементы совершают колебательные движения около своих положений в этих узлах. Правда иногда из–за флуктуаций такой порядок нарушается, и частица может покинуть свой узел. В жидкостях до сих пор нет однозначного определения, какие частицы участвуют в тепловом движении и каков характер такого движения.

Наиболее удачно молекулярно – кинетическая теория применима к газам. В разреженных газах, например, в воздухе при обычных условиях, структурными элементами являются молекулы, которые участвуют в тепловом хаотическом движении. Хотя молекулы газа имеют малые размеры, они сталкиваются между собой. Расчеты, сделанные на основе кинетической теории и которые находят косвенные подтверждения в опытах, говорят о том, что в промежутках между столкновениями молекулы пролетают расстояние, которое намного превышает размеры этих молекул. Законы механики говорят о том, что в свободном движении траектории молекул представляют прямые линии. Таким образом, все три утверждения косвенно подтверждаются на примере разреженных газов. Слово косвенно говорит о том, что невозможно увидеть молекулы газов при помощи каких либо микроскопов, поэтому нельзя следить за молекулами и убедиться в том, что молекулы сталкиваются, что они пролетают путь свободного пролета в виде прямой. Но все это подтверждается косвенно: расчеты тех свойств, которые можно наблюдать и измерять, выполненные на основе молекулярно – кинетической теории, совпадают с измерениями. Так, давление, которое газ оказывает на стенки сосуда, в

котором он находится, в молекулярно – кинетической теории объясняется тем, что молекулы сталкиваются с этими стенками и передают им импульс хаотического движения. Основанная формула кинетической теории, которая получена путем подсчета числа столкновений и импульса, которые передается стенке при каждом столкновении, прекрасно согласуется с экспериментами. Хорошо описываются процессы переноса: диффузия, вязкость, теплопроводность, термодиффузия. Более того, исследования последних лет показывают, что после уточнения того, какие частицы обособленно хаотически движутся и таким образом определяют свойства газов, утверждения кинетической теории можно применять и к плотным газам при низких температурах, когда некоторые молекулы при столкновениях слипаются и образуют кластеры. Кластерная модель газов является логическим развитием идей молекулярно – кинетической теории, она позволяет расширить область ее применимости. Причем кластерная модель привела к необходимости выделить в отдельный раздел физики – мезоскопическую физику, так как в ней обнаружено, что большие кластеры в газах, которые существуют при больших давлениях, навязывают газу свойства, характерные для новой фазы, в частности – жидкости.

Учитывая сказанное можно утверждать, что изучением кинетической теории необходимо не только для того, чтобы описывать свойства газов. Освоение методов кинетической теории, позволит применять их к таким объектам, которые уже не являются газами. Особенно важно то, что кинетическая теория обладает свойством предсказательности, т.е. с ее помощью можно предсказывать такие явления, которые еще не удавалось обнаружить.

В методическом пособии изложена элементарная кинетическая теория, в которой свойства газов рассчитываются на основе применения равновесной функции распределения молекул по скоростям. Как показано в этом пособии, элементарная теория достаточно хорошо описывает многие наблюдаемые явления. К настоящему времени развита строгая кинетическая теория, в которой используется неравновесная функция распределения. Эта функция является решением кинетического уравнения Больцмана. Такая теория несколько лучше описывает эксперимент. Но главное ее достоинство заключается в том, что в ней используются мощные математические методы, освоение которых дает возможность применять их при решении других сложных задач. Кроме того, само кинетическое уравнение Больцмана представляет огромный интерес не только потому, что оно широко используется для описания различных процессов, но и потому, что анализ именно этого уравнения привел к возникновению одной из интереснейших проблем современной науки – проблемы необратимости.

В общей постановке изложение методов решения уравнения Больцмана изложено достаточно подробно в ряде монографий [3 - 5]. Из – за громоздкости математических выкладок подробно изложить строгую теорию не представляется возможным, поэтому в настоящем пособии излагается линейная теория, которая применима к слабо неоднородным газам. Однако в этой теории используются все основные приемы строгой теории и она достаточно хорошо работает в своей области применимости.

Перед тем как приступить к изложению теории явлений переноса целесообразно рассмотреть основные приемы кинетической теории применительно к равновесному газу, в частности, для получения основной формулы кинетической теории для давления.

Современные строгие теории основаны на применении неравновесной функции распределения, однако в этой функции главную часть составляет локально – равновесная функция, поэтому перед тем как приступить к изложению строгой теории, будет рассмотрен вывод локально – равновесной функции распределения.

Основная формула кинетической теории газов

Чтобы творчески применять строгую кинетическую теории необходимо в каждом выражении видеть прозрачный физический смысл. Физический смысл хорошо проявляется в наглядной элементарной теории, в которой не учитывается то, что молекулы обладают разными по модулю скоростями, но учитывается только их хаотическое распределение по направлениям скорости. такое упрощенное описание использовалось в первых работах по кинетической теории газов. Оно позволяет получить основные соотношения без громоздких математических выкладок, а распределение молекул по скоростям учесть тем, что считать, что все молекулы имеют скорость, равную средней скорости. Применим такое упрощенное описание для вывода основной формулы кинетической теории газов.

Основная формула кинетической теории газов позволяет связать термодинамическую температуру, которая по определению входит в уравнение Менделеева-Клапейрона, со средней кинетической энергией хаотического движения молекул идеального газа [6 - 8]. В строгой кинетической теории эта связь используется в качестве нормировки для функции распределения.

Вывод основной формулы кинетической теории базируется на модели идеального газа, в котором в условиях равновесия молекулы участвуют в непрерывном хаотическом движении, а давление на стенку, ограничивающего газ, обусловлено изменением импульса молекул при их столкновениях со стенкой. В равновесии при столкновениях со стенкой размеры молекул не существенны, они существенны при описании процессов в неоднородных газах, поэтому для равновесных свойств, которые описываются уравнением состояния идеального газа и используется модель идеального газа. Таковы свойства газа Больцмана: для равновесия - модель идеального газа, а для процессов – нет: молекулы - не материальные точки.

Хаотический характер распределения молекул по скоростям, т.е. отсутствие какого-то преимущественного направления для скорости и ее размера позволяет на первом этапе упростить рассмотрение путем допущения о том, что все молекулы движутся с равными по модулю скоростями.

Давление вводится как параметр состояния, определяемый силой, действующей в теле на единицу площади поверхности по нормали к ней. Эту силу можно найти путем подсчета числа молекул, которые за единицу времени столкнутся со стенкой и передадут ей импульс. Чтобы полученный результат можно было применить и для условий локального равновесия, рассмотрим элементарную площадку поверхности dS_x и область газа, прилегающего к ней в объеме $v_x dt dS_x$. Ось ox выберем в виде внешней для газа нормали к площадке dS_x , о чем говорит нижний индекс x . Промежуток времени dt выберем таким, чтобы молекулы, находящиеся в объеме $v_x dt dS_x$ и движущиеся в направлении к стенке ($v_x > 0$) долетели до нее без столкновений с другими молекулами.

Составляющая импульса одной молекулы вдоль оси ox до столкновения со стенкой имеет вид:

$$K_{ix} = m_i v_x, \quad (1.1)$$

где K_{ix} - x -составляющая импульса одной молекулы,

m_i - масса одной молекулы,

v_x - x - составляющая скорости молекулы.

После упругого столкновения молекулы со стенкой x -составляющая ее импульса изменит только знак, поэтому изменение x -составляющей импульса одной молекулы в результате столкновения со стенкой вычисляется так:

$$\Delta K_{ix} = -m_i v_x - m_i v_x = -2m_i v_x. \quad (1.2)$$

В элементарном объеме $v_x dt dS_x$ содержится $nv_x dt dS_x$ молекул, половина из которых имеют положительную x - составляющую скорости, т.е. движущихся к стенке. Будем считать, что за промежуток времени dt каждая из выбранных нами молекул столкнется со стенкой, поэтому изменение их импульса за это время dt будет равно:

$$dK_x = -2m_i v_x \frac{n}{2} v_x dt dS_x = -nm_i v_x v_x dt dS_x . \quad (1.3)$$

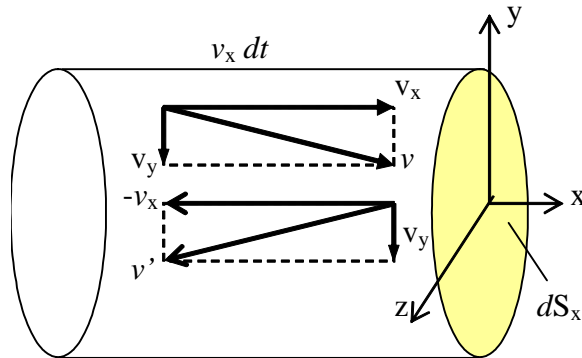


Рис.1.3. Схема столкновений молекулы с площадкой dS_x .

v - скорость молекулы до столкновения, v' - скорость молекулы после столкновения, v_x - x - составляющая скорости молекулы, v_y - y - составляющая скорости молекулы.

Система, состоящая из молекул в выбранном элементарном объеме $nv_x dt dS_x$ и области стенки площадью dS_x , является замкнутой механической системой, поэтому изменение импульса площадки dK_{xw} равно минус изменению импульса молекул за счет столкновений их со стенкой $dK_{xw} = -dK_x$.

Производная от импульса площадки по времени равно силе, действующей на эту элементарную площадку:

$$\frac{dK_{xw}}{dt} = F_x . \quad (1.4)$$

Мы рассматриваем силу, действующую на площадку dS_x вдоль оси ox , поэтому в результате деления силы на размер площадки мы получим составляющую тензора давлений:

$$p_{xx} = \frac{F_x}{dS_x} . \quad (1.5)$$

Подставляя в выражение для p_{xx} все найденные величины, получим:

$$p_{xx} = \frac{dK_{xw}}{dt} = nm_i v_x v_x . \quad (1.6)$$

Справедливый в условиях равновесия закон Паскаля в наших обозначениях запишется так:

$$p_{xx} = p_{yy} = p_{zz} , \quad (1.7)$$

где p_{yy} , p_{zz} – компоненты тензора давлений, которые находятся так же, как и p_{xx} , если рассматривать соответствующие составляющие вектора скорости молекул и их столкновения с соответствующей площадкой.

Таким образом, экспериментальный закон Паскаля и полученное в кинетической теории выражение для компонентов тензора давления в равновесии дает:

$$nm_i v_x v_x = nm_i v_y v_y = nm_i v_z v_z \quad (1.8)$$

или,

$$v_x v_x = v_y v_y = v_z v_z ,$$

где с учетом распределения молекул по скоростям подразумевается среднее значение этих произведений, что отмечено угловыми скобками:

$$\langle v_x v_x \rangle = \langle v_y v_y \rangle = \langle v_z v_z \rangle . \quad (1.9)$$

Из этого соотношения следует фундаментальный принцип равнораспределения энергии по степеням свободы, т.е. средняя кинетическая энергия, приходящаяся на каждую степень свободы одинакова. Используя выражение для квадрата скорости через составляющие, можно записать:

$$\langle v_x v_x \rangle = \frac{1}{3} \langle v^2 \rangle . \quad (1.10)$$

В равновесии касательные напряжения отсутствуют, и манометр позволяет измерить статическое давление p , которое по размеру (по численному значению) совпадает с компонентом тензора давлений p_{yy} , что дает возможность выразить статическое давление через среднюю энергию теплового движения молекул в газе:

$$p = \frac{1}{3} nm_i \langle v^2 \rangle = \frac{2}{3} n \left\langle \frac{m_i v^2}{2} \right\rangle = \frac{2}{3} n \langle \epsilon_i \rangle . \quad (1.11)$$

В этих соотношениях связь давления со средней энергией теплового хаотического движения молекул получена на основе чисто механического рассмотрения столкновений молекул со стенкой. В связи с особой важностью, полученную формулу называют *основной формулой кинетической теории газов для давления*, так как она позволяет связать величину, определенную в механике – давление - с величиной, которая вводится в термодинамике - с температурой. Чтобы получить эту связь, приравняем давление, которое входит в уравнение состояния идеального газа, полученному нами из микроскопического рассмотрения (формула (1.11)), давлению, которое входит в уравнение состояния Менделеева-Клапейрона

$$pV = \frac{m}{M} RT . \quad (1.12)$$

Это уравнение приведем к виду, более удобному для микроскопического рассмотрения в рамках кинетической теории:

$$p = nkT . \quad (1.13)$$

Для этого используем соотношение между универсальной газовой постоянной и постоянной Больцмана:

$$p = \frac{m}{MV} RT = \frac{m}{m_i N_A V} RT = \frac{m}{m_i V} \frac{R}{N_A} T = nkT , \quad (1.14)$$

где N_A - постоянная Авогадро,

k - постоянная Больцмана.

Заметим, что такой вид уравнения позволяет применять его для описания соотношений между макропараметрами идеального газа без ограничения на количество газа, что перспективно для описания локально-равновесных параметров, а также для описания состояния газа с переменным числом молей.

Запишем полученную в кинетической теории формулу (1.11) для давления в виде:

$$p = \frac{2}{3} n \langle \epsilon_i \rangle . \quad (1.15)$$

Левые части последних формул совпадают, поэтому приравняем правые части и получим:

$$\frac{2}{3} n \langle \epsilon_i \rangle = nkT . \quad (1.16)$$

Отсюда следует, что средняя кинетическая энергия теплового движения молекулы газа выражается через температуру:

$$\langle \epsilon_i \rangle = \frac{3}{2} kT . \quad (1.17)$$

Учитывая, что средняя энергия хаотического движения одной молекулы газа Больцмана $\langle \epsilon_i \rangle$ равна сумме трех одинаковых составляющих, можно заключить, что на одну степень свободы приходится $\frac{1}{2} kT$ энергии. С другой стороны, полученное соотношение можно использовать для молекулярно-кинетической интерпретации термодинамической температуры, входящей в эмпирическое уравнение состояния идеального газа. Приведенные формулы позволяют записать:

$$\frac{\langle m_i v^2 \rangle}{2} = \frac{3}{2} kT . \quad (1.18)$$

Эту формулу можно назвать *основной формулой кинетической теории для температуры*. Из неё видно, что температура пропорциональна средней кинетической энергии теплового хаотического движения молекул газа в состоянии равновесия:

$$T = \frac{2}{3k} \left\langle \frac{m_i v^2}{2} \right\rangle . \quad (1.19)$$

В качестве коэффициента пропорциональности в этих формулах используется постоянная Больцмана k , которая показывает, сколько кельвинов содержится в одном

джоуле энергии, т.е. в СИ эта постоянная измеряется в Дж/ К. Хотя и энергия, и температура имеют единицы измерения энергетических величин, энергия является экстенсивным параметром, в то же время температура – интенсивным, поэтому у постоянной Больцмана такая размерность, обусловленная специальной размерностью температуры: $\dim T = \Theta$, которая является основной величиной в Международной системе единиц СИ.

Равновесная функция распределения молекул по скоростям

На практике не встречаются термодинамические системы, находящиеся в абсолютном равновесии, так как любая система подвергается влиянию гравитационного поля, влиянию окружающих её тел. Однако, абстрактная модель газа в условиях абсолютного равновесия является удобной для изучения. Удобство обусловлено тем, что в абсолютном равновесии параметры системы, такие как температура, давление, плотность, концентрация смеси во всех точках одинаковая, т.е. - система является однородной, и эти параметры не изменяются во времени: состояние стационарное. В таких условиях можно долго наблюдать за системой и измерить параметры её состояния.

Кроме того, например, воздух в атмосфере не сильно отличается от идеального газа в равновесном состоянии, поэтому удобная модель не лишена и смысла. Изучив такую модель, можно переходить к изучению отклонений её от абсолютного равновесия и изучать системы далекие от равновесия. При этом обычно можно с достаточной точностью использовать введенные для равновесного состояния параметры для исследования неоднородных систем – систем, в которых параметры в разных её точках разные.

Абсолютный максвеллиан

В условиях абсолютного равновесия молекулы газа участвуют только в тепловом хаотическом движении, и распределение их по этим скоростям описывается максвелловской функцией распределения – абсолютным максвеллианом. Ниже это распределение будет получено как распределение Гаусса в пространстве скоростей.

Огромное количество столкновений, которые происходят между молекулами в газах, позволяют считать, что скорость молекулы, с которой столкнется выбранная молекула (тестовая частица или пробная), является случайной величиной [5 - 9]. В связи с этим, случайный характер будет носить и скорость выбранной молекулы после каждого столкновения. В равновесии нет никакого выбранного преимущественного направления движения, поэтому каждая составляющая скорости выбранной молекулы также изменяется в столкновениях случайным образом, т.е. хаотически. Это приводит к установлению некоторого равновесного распределения молекул по скоростям. Здесь предполагается, что полевые молекулы, с которыми столкнётся пробная, уже имеют хаотическое распределение по скоростям. Хаотический характер распределения позволяет представить каждую составляющую скорости молекулы в виде суммы приращений в каждом отдельном столкновении:

$$v_x = \sum_{i=1}^{\infty} \Delta v_{xi} \quad , \quad v_y = \sum_{i=1}^{\infty} \Delta v_{yi} \quad v_z = \sum_{i=1}^{\infty} \Delta v_{zi} \quad . \quad (2.1)$$

Хаотический характер распределения позволяет считать, что проекции скорости молекулы не зависят друг от друга и распределены по закону Гаусса:

$$\varphi(v_x^2) = Ae^{-\alpha v_x^2}, \quad \varphi(v_y^2) = Ae^{-\alpha v_y^2}, \quad \varphi(v_z^2) = Ae^{-\alpha v_z^2}. \quad (2.2)$$

Вероятность того, что проекция скорости v_x находится в интервале от v_x до $v_x + dv_x$, можно записать так:

$$d\mathcal{P}(v_x) = \varphi(v_x^2)dv_x = Ae^{-\alpha v_x^2}dv_x, \quad (2.3)$$

где $\mathcal{P}(v_x)$ - обозначена вероятность как функция составляющей скорости молекулы.

Аналогичная формула записывается и для других составляющих скорости. Вероятность того, что скорость v находится в интервале от v до $v + dv$, находится по правилу подсчета вероятности трех независимых событий, т. е. как произведение вероятностей отдельных событий:

$$d\mathcal{P}(v_x, v_y, v_z) = A^3 e^{-\alpha(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)} dv_x dv_y dv_z. \quad (2.4)$$

Условие нормировки для записанной вероятности, которые представляют собой утверждение о том, что найти молекулу, обладающую какой – либо скоростью является достоверным событием,

$$\iiint d\mathcal{P}(v_x, v_y, v_z) = \iiint A^3 e^{-\alpha(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)} dv_x dv_y dv_z = 1 \quad (2.5)$$

вместе с аналогичным условием для средней энергии хаотического движения молекул в соответствии с основной формулой кинетической теории

$$\frac{\langle m_i v^2 \rangle}{2} = \frac{3}{2} kT \quad (2.6)$$

дают возможность установить значение входящих в эти выражения постоянных A и α . При выполнении интегрирования удобно перейти к интегрированию по модулю скорости и заменить произведение трех элементарных объемов в пространстве скоростей на элементарный объем в сферических координатах:

$$dv_x dv_y dv_z = 4\pi v^2 dv. \quad (2.7)$$

После интегрирования и исключения постоянных A и α с помощью нормировок, получим выражение для элементарной вероятности,

$$d\mathcal{P}(v) = 4\pi v^2 \left(\frac{m_i}{2\pi kT} \right)^{3/2} e^{-\frac{m_i v^2}{2kT}} dv, \quad (2.8)$$

которую можно записать через вероятность, приходящуюся на единицу элементарного объема в пространстве скоростей (через плотность вероятности $M(v)$):

$$d\mathcal{P}(v) = M dv . \quad (2.9)$$

Плотность вероятности $M(v)$ называется максвелловской функцией распределения молекул по скоростям или абсолютным максвеллианом, что и отражено особым обозначением. Она имеет вид:

$$M(v) = 4\pi v^2 \left(\frac{m_i}{2\pi kT} \right)^{3/2} e^{-\frac{m_i v^2}{2kT}} , \quad (2.10)$$

где m_i - масса одной молекулы,

T - температура газа,

v - модуль скорости молекул,

k - постоянная Больцмана.

Видно, что температура, которая вошла в эту функцию через основную формулу кинетической теории газов (соотношение 1.19), служит модулем этого распределения..

По определению максвелловская функция $M(v)$ дает вероятность обнаружить молекулу в единице объема геометрического пространства и пространства скоростей и, как видно из вывода, она представляет собой гауссово распределение в пространстве скоростей. Если умножить $M(v)$ на числовую плотность молекул газа n , то получим ожидаемое число молекул в единице объема фазового пространства. Плотность числа частиц, обладающих скоростью v в интервале от v до $v + dv$., запишется так:

$$dn(v) = nM(v) dv . \quad (2.11)$$

Максимум максвелловской функции соответствует значению скорости, которую называют наиболее вероятной скоростью, так как такой скоростью с наибольшей вероятностью будет обладать наугад выбранная молекула. Условие максимума дает следующее выражение для этой скорости:

$$v_p = \sqrt{\frac{2kT}{m_i}} , \quad (2.12)$$

v_p – наивероятнейшая скорость.

Полученная функция для каждого газа имеет свой вид, который зависит от массы молекулы. Универсальный вид можно получить, если в качестве масштаба скоростей молекул использовать наивероятнейшую скорость. В этих переменных число частиц в единице объема, имеющих скорость в интервале от v до $v + dv$ запишется так:

$$dn(v) = nM(v)dv = 4\pi v^2 n \left(\frac{m_i}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp \left[-\frac{m_i v^2}{2kT} \right] dv . \quad (2.13)$$

Локально-максвелловская функция распределения

Полученные функции дают распределение молекул по скоростям в условиях абсолютного равновесия, поэтому аргументом абсолютного максвеллиана является модуль скорости теплового хаотического движения молекул v . Для описания процессов переноса необходимо учесть, что равновесие можно принимать только в пределах отдельного домена, т.е. необходимо рассматривать локальное равновесие, и в этом случае распределение молекул по скоростям описывается локально-максвелловской функцией.

Процессы переноса в газах просто объясняются тем, что в двух встречных направлениях через воображаемую контрольную площадку пролетает неодинаковое количество молекул. Разница в количестве молекул, которые при одинаковом модуле скорости имеют разные направления скорости, имеет место, когда в соседних доменах существует локальное равновесие, соответствующее различным значениям макропараметров. Поэтому локально-равновесная функция будет иметь семь независимых аргументов: три компоненты скорости молекул в лабораторной системе отсчета $\vec{\xi}_\alpha$, три компоненты радиуса-вектора \vec{r} и время t .

В условиях локального термодинамического равновесия функция распределения будет содержать локально-равновесные макропараметры, которые являются функциями координат и времени, и локально-равновесная функция будет функцией координат и времени через эту зависимость. Для описания процессов переноса, надо рассмотреть смесь газов, состоящую из нескольких сортов молекул, поэтому локально-максвелловская функция записывается для каждого компонента смеси.

Таким образом, локально-равновесная функция распределения молекул по скоростям компонента смеси под номером α , будет иметь вид:

$$f_\alpha^0(\vec{\xi}_\alpha, \vec{r}, t) = n_\alpha(\vec{r}, t) \left(\frac{m_\alpha}{2\pi kT(\vec{r}, t)} \right)^{3/2} \exp \left[-\frac{m_\alpha}{2\pi kT(\vec{r}, t)} (\vec{\xi}_\alpha - \vec{W}(\vec{r}, t))^2 \right], \quad (2.14)$$

где $\vec{\xi}_\alpha$ – скорость молекул компонента α в первичной инерциальной системе отсчета,

$n_\alpha(\vec{r}, t)$ – локальная парциальная числовая плотность молекул компонента α ,

$\vec{W}(\vec{r}, t)$ – скорость движения всей смеси как функция координаты и времени.

Эта функция является основой для описания процессов в неоднородных газовых смесях, так как обычно в кинетической теории рассматриваются слабо неоднородные газы. При этом неравновесная функция отличается от локально-равновесной на малую добавку.

Лекции

по дисциплине: «Кинетическая теория газов»

Автор: канд. физ.-мат.наук, доцент

Абдуает Зайтович Айткожаев

Лекция 5, 6, 7, 8

Строгая кинетическая теория в линейном

приближении

В элементарной теории наблюдаемые потоки находились путём подсчета числа частиц, пересекающих контрольную площадку с учётом тех молекулярных признаков, которые они могут переносить. При этом всегда рассматривается элементарный объём, в пределах которого распределения молекул по скоростям описывается локально-равновесной функцией распределения.

В строгой кинетической теории [3, 4] используется неравновесная функция распределения, которая находится из уравнения для неё. Такое уравнение принято называть кинетическим уравнением. Для одночастичной функции распределения кинетическое уравнение впервые получил Л. Больцман [10], и оно называется уравнением Больцмана. Вывод уравнения, который предложил Больцман, учитывает физический смысл функции распределения $f_\alpha(\vec{\xi}_\alpha, \vec{r}, t)$. В современной литературе он называется физическим выводом, чтобы подчеркнуть, что, во-первых, теперь разработаны более формализованные способы его получения и, во-вторых, – что вывод не является строго математическим, а содержит приёмы, которые оправданы физическим смыслом и представляют собой развитие методов элементарной теории.

Уравнение Больцмана вытекает из балансового соотношения для частиц выбранного вида, т.е. для частиц, которые принадлежат одному компоненту смеси и имеют одинаковую в пределах элементарного объема в пространстве скоростей скорость. Здесь просматривается гениальная идея Больцмана о детализации описания: из всей смеси газов мысленно выделяются только молекулы одного сорта по химически свойствам, затем из них выбираются только те молекулы, которые имеют одинаковую скорость. При этом необходимо отметить, что при статистическом описании, которое лежит в основе кинетической теории, нельзя говорить о том, сколько молекул имеют строго определенную скорость, а можно говорить только о значении скорости в определенном пределе. В качестве предела выбирается элементарный объем в пространстве скоростей,

$$d\vec{\xi} = d\xi_x d\xi_y d\xi_z = d^3\xi . \quad (3.1)$$

Поэтому, когда для краткости говорят, что молекулы обладают одинаковой скоростью теплового движения $\vec{\xi}$, то подразумевают, что они имеют скорости

$$\vec{\xi} \pm d\vec{\xi} .$$

Такие частицы, которые имеют одинаковую скорость, Л.Больцман назвал частицами выбранного вида. Через функцию распределения число частиц выбранного вида в единице объема выражается так:

$$dn_\alpha(\vec{\xi}_\alpha, \vec{r}, t) = f_\alpha(\vec{\xi}_\alpha, \vec{r}, t) d\vec{\xi}_\alpha , \quad (3.2)$$

где n_α – парциальная числовая плотность молекул компонента под номером α ,
 \vec{r} – радиус-вектор.

Это соотношение можно использовать, чтобы придать физический смысл функции $f_\alpha(\vec{\xi}_\alpha, \vec{r}, t)$, которая является основной в кинетической теории газов. Во первых, по определению n_α представляет собой парциальную числовую плотность молекул вида α (т.е. число молекул компонента α в единице объема), поэтому все рассмотрение ведется для величин, приходящихся на единицу объема пространства. Во вторых – будучи умноженной на размер элементарного объема в пространстве скоростей $d\vec{\xi}_\alpha$ эта функция

дает число частиц выбранного вида, а точнее – вероятность обнаружить такую частицу в единице объема пространства, поэтому сама функция $f_\alpha(\vec{\xi}_\alpha, \vec{r}, t)$ является плотностью вероятности, т.е. вероятности, приходящейся на единицу объема и геометрического пространства, и пространства скоростей.

В строгой кинетической теории используется неравновесная функция распределения $f_\alpha(\vec{\xi}_\alpha, \vec{r}, t)$, которая отличается от локально–равновесной $f_\alpha^0(\vec{\xi}_\alpha, \vec{r}, t)$ малой поправкой – функцией возмущения ϕ_α :

$$f_\alpha(\vec{\xi}_\alpha, \vec{r}, t) = f_\alpha^0(\vec{\xi}_\alpha, \vec{r}, t)[1 + \phi_\alpha], \quad (3.3)$$

$$\phi_\alpha \ll 1.$$

Чтобы с помощью этой функции описывать газы, она нормируется так, чтобы моменты от неё совпадали с наблюдаемыми макропараметрами.

$$n_\alpha(\vec{r}, t) = \int f_\alpha(\vec{\xi}_\alpha, \vec{r}, t) d^3\xi_\alpha, \quad (3.4)$$

где $n_\alpha(\vec{r}, t)$ – локально–равновесная числовая плотность как функция радиуса-вектора и времени.

$$\vec{W}(\vec{r}, t) = \frac{1}{n_\alpha} \int \vec{\xi}_\alpha f_\alpha^0 d^3\xi_\alpha. \quad (3.5)$$

Использование такой нормировки позволяет ввести скорость движения всей смеси (гидродинамическую скорость), одинаковую для всех компонентов смеси. Такая скорость используется в механике сплошных сред для описания течения жидкости или газа. Обычно она определяется как производная от радиуса-вектора:

$$\vec{W} = \frac{\partial \vec{r}}{\partial t}. \quad (3.6)$$

Температура и статическое давление выражаются через средние скорости теплового хаотического движения молекул, которая определяется так:

$$\vec{v}_\varepsilon(\vec{r}, t) = \vec{\xi}_\alpha - \vec{W}(\vec{r}, t). \quad (3.7)$$

Здесь отражена одна особенность так называемого гидродинамического приближения в строгой кинетической теории. Скорость молекул $\vec{\xi}$ в первичной системе отсчета является аргументом для функции распределения, и она не зависит ни от времени, ни от радиуса-вектора. Скорость теплового хаотического движения \vec{v} через зависимость от радиуса-вектора и времени гидродинамической скорости $\vec{W}(\vec{r}, t)$ также зависит от них. Это обстоятельство позволяет выразить локальную температуру $T(\vec{r}, t)$ и давление $p(\vec{r}, t)$ через скорость $\vec{v}(\vec{r}, t)$:

$$\frac{3}{2}nkT = \int \frac{mv^2}{3} f d^3\xi, \quad (3.8)$$

Тензор давления для смеси определяется как сумма парциальных тензоров:

$$\vec{P} = \sum_{\alpha=1}^s m_\alpha \int \vec{v}_\alpha \vec{v}_\alpha f_\alpha d^3\xi_\alpha = p\vec{I} + \vec{P}^{(1)}. \quad (3.9)$$

Видно, что эти нормировки являются следствием основной формулы кинетической теории газов.

В неоднородных смесях эти макропараметры связаны уравнениями сохранения [5]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_\alpha}{\partial t} &= -\vec{W} \cdot \vec{\nabla} n_\alpha - n_\alpha \vec{\nabla} \cdot \vec{W} - \vec{\nabla} \cdot \vec{j}_\alpha, \\ \frac{d\vec{j}^p}{dt} + \rho \frac{d\vec{W}}{dt} + \vec{\nabla} \cdot \vec{P} + \vec{j}^p \cdot \vec{\nabla} \vec{W} + \vec{j}^p \vec{\nabla} \cdot \vec{W} - \sum_\alpha n_\alpha \vec{F}_\alpha &= 0, \end{aligned} \quad (3.10)$$

$$\frac{dp}{dt} + p \vec{\nabla} \cdot \vec{W} + \frac{2}{3} \vec{P} : \vec{\nabla} \vec{W} + \frac{2}{3} \vec{\nabla} \cdot \vec{Q}^k + \frac{2}{3} \vec{j}^p \cdot \frac{d\vec{W}}{dt} - \frac{2}{3} \sum_{\alpha=1}^s (\vec{j}_\alpha \cdot \vec{F}_\alpha - n_\alpha \vec{W} \cdot \vec{F}_\alpha) = 0,$$

$$\vec{j}^p = \sum_{\alpha=1}^s m_\alpha \vec{j}_\alpha; \quad \frac{d}{dt} \equiv \frac{\partial}{\partial t} + \vec{W} \vec{\nabla},$$

где \vec{W} – скорость конвекции, определяемая нормировкой (3.5), \vec{P} – тензор напряжений смеси, определяемой нормировкой (3.9), \vec{Q}^k – поток энергии всей смеси как свёрнутый момент третьего порядка, $\vec{\nabla} \vec{W}$ – тензор градиента скорости, $\vec{\nabla} \cdot \vec{P}$ – вектор, образованный свёрнутым произведением векторного оператора $\vec{\nabla}$ на тензор второго ранга \vec{P} , \vec{F}_α – объёмная сила, действующая на каждую частицу, \vec{j}^p – суммарный поток массы необратимой природы. Необходимо отметить, что эти уравнения получены из уравнения Больцмана [11], но для изложения в учебном пособии их удобно записать раньше самого этого уравнения, так как функция распределения также должна удовлетворять соответствующему уравнению сохранения с источником – балансовому соотношению, – но не в трёхмерном пространстве, а в шестимерном.

Как видно из (3.4), (3.5), аргументами для макропараметров служат время и три координаты, а для функции распределения – ещё и три составляющих скорости. В связи с этим и будем искать кинетическое уравнение в виде балансового соотношения в шестимерном пространстве.

Балансовые соотношения (3.10) в дальнейшем мы будем использовать в так называемом гидродинамическом приближении, когда в них пренебрегается всеми членами, связанными с необратимым переносом: диффузией, вязкими напряжениями, теплопроводностью. В частности уравнение непрерывности (первое из (3.10)) с учётом этого приближения можно записать так:

$$\frac{\partial n_\alpha}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot (\vec{W} n_\alpha). \quad (3.11)$$

Если ввести полную (субстанциональную) производную:

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \vec{W} \cdot \vec{\nabla}, \quad (3.12)$$

то (3.11) можно записать так:

$$\frac{dn_\alpha}{dt} = -n_\alpha \vec{\nabla} \cdot \vec{W}. \quad (3.13)$$

Если сделать ещё одно допущение: дивергенция скорости $\vec{\nabla} \cdot \vec{W} = 0$, то уравнение непрерывности будет иметь простейший вид:

$$dn_{\alpha}/dt = 0. \quad (3.14)$$

Таким образом, в гидродинамическом приближении для течения с постоянной скоростью в системе координат, связанной с газом, плотность числа частиц постоянна. Это может служить отправным моментом при выводе кинетического уравнения..

Физический вывод линейного кинетического уравнения

Рассмотрим неоднородную газовую смесь, состоящую из s компонентов. Будем считать, что неоднородности слабые, поэтому принцип локального равновесия выполняется, а функция распределения подчиняется линейному кинетическому уравнению, которое принято называть уравнением Больцмана-Лоренца. Применяемые в дальнейшем приёмы справедливы для газа Больцмана. В этой модели каждый компонент смеси подчиняется уравнению состояния идеального газа, но при этом молекулы обладают конечным размером, что приводит к их столкновениям. Такие на первый взгляд противоречивые требования на практике с достаточной точностью удовлетворяются. Например, воздух при обычных для нас условиях достаточно хорошо удовлетворяет этим требованиям.

В настоящее время формулы для коэффициентов переноса, полученные для газа Больцмана, широко используются на практике в различных технологических расчётах. С целью применения при повышенных давлениях или при низких температурах в эти формулы вводят поправки. Поэтому и в этом случае газ Больцмана является основной моделью.

В неоднородных газах число частиц выбранного вида может изменяться из-за того, что эти частицы перемещаются из областей с одними макропараметрами в области с другими макропараметрами, т. е. изменения могут быть связаны с неоднородностью в геометрическом пространстве. Число частиц выбранного вида определяется и скоростью, около которой выбирается элементарный объём в скоростном пространстве, поэтому их число будет изменяться при изменении их скорости под действием внешней силы.

Если бы были только названные причины изменения числа частиц выбранного вида, то $f(\vec{\xi}, \vec{r}, t)$ подчинялась бы обычному уравнению непрерывности типа (4. 5) в шестимерном пространстве.

Как впервые подметил Л. Больцман [10], для частиц выбранного вида существует ещё один способ изменения $f(\vec{\xi}, \vec{r}, t)$ – столкновения молекул. Под столкновениями здесь подразумевается такое взаимное влияние частиц, при котором изменяется их скорость, что и приводит к их выходу из рассматриваемой группы.

Частицы выбранного вида между собой не сталкиваются, так как они имеют одинаковую (в пределах элементарного объёма) скорость. Но они будут сталкиваться с частицами, имеющими другую скорость. Такие частицы принято называть полевыми частицами. Полевые частицы представляют собой поле или «Вселенную», в которой движутся пробные частицы. Пробные частицы изменяют свою скорость как при столкновении с частицами другого компонента, так и частицами того же компонента, что и пробные.

Столкновения частиц приводит не только к их выбыванию, но и к появлению частиц выбранного вида. Действительно, если в результате столкновения скорость частицы окажется равной скорости пробных частиц выбранного вида, то она войдёт в число выбранных.

Чтобы найти быстроту исчезновения (мощность стока) частиц выбранного вида и быстроту их появления необходимо подсчитать число соответствующих столкновений. В уравнении Больцмана эти члены обычно записываются в правой части, поэтому их называют просто правой частью или интегралом столкновений (столкновительным членом или оператором столкновений). Левая часть представляет собой полную производную в шестимерном пространстве от функции распределения, так как она даёт ожидаемое число частиц выбранного вида в единице шестимерного элементарного объёма. Такая запись отражает принципиальную разницу потоковых членов левой части и правой части, приводящей к появлению необратимости.

При описании смесей кинетическое уравнение записывается для каждого компонента смеси. Таким образом, левую часть кинетического уравнения для α компонента смеси запишем так:

$$\frac{df_{\alpha}}{dt} = \frac{\partial f_{\alpha}}{\partial t} + \bar{\xi}_{\alpha} \cdot \frac{\partial f_{\alpha}}{\partial t} + \frac{\bar{F}_{\alpha}}{m_{\alpha}} \cdot \frac{\partial f_{\alpha}}{\partial \bar{\xi}_{\alpha}}, \quad (3.15)$$

где $\bar{\xi}$ – скорость частиц в лабораторной системе отсчёта, $\bar{F}_{\alpha}/m_{\alpha} = \dot{\bar{\xi}}_{\alpha}$ – ускорение частицы, имеющей массу m_{α} , под действием силы \bar{F}_{α} .

В кнудсеновском газе частицы между собой не сталкиваются, и функция распределения $f^{(p)}$ будет описываться таким уравнением:

$$df_{\alpha}^{(p)}/dt = 0. \quad (3.16)$$

Для газа Больцмана правая часть должна учитывать взаимные столкновения частиц, поэтому необходимо рассмотреть динамику парных столкновений. Столкновения пробных частиц с полевыми (прямые столкновения) приводят к выбыванию из числа выбранного вида, а обратные – к их появлению, что в кинетическом уравнении записывается в виде двух источников частиц выбранного вида:

$$\frac{df}{dt} = \Delta^{(+)} - \Delta^{(-)}. \quad (3.17)$$

Число прямых столкновений выражается через интеграл от произведения одночастичных функций, так же, как это делалось в элементарной теории [1] при нахождении частоты столкновений, с той лишь разницей, что теперь эта частота находится не равновесного газа, а только для локально-равновесного. При этом учитывается, что полевые частицы могут находиться на разных прицельных расстояниях от элементарного объема тестовых частиц $d^3\vec{r}_{\alpha}$, т. е. столкновения могут происходить с разными прицельными параметрами b . У нас нет возможности учесть изменение функции распределения полевых частиц f_{β} с изменением этого расстояния, поэтому пренебрежём малыми отклонениями f_{β} от локально-равновесной f_{β}^0 . Тогда скорость выбывания частиц выбранного вида находится так:

$$\Delta_{\alpha\beta}^{(-)} = \int f_{\alpha} f_{\beta}^0 g b \cdot db \cdot d\bar{\epsilon} \cdot d^3\xi_{\beta}, \quad (3.18)$$

где g – относительная скорость,
 b – прицельное расстояние,

$\hat{\epsilon}$ – угол цилиндрической системы координат.

Видно, что полевые частицы мы описываем локально-максвелловской функцией распределения, поэтому в результате получим линейное кинетическое уравнение – так называемое уравнение Больцмана-Лоренца [5, 11].

Быстрота появления частиц выбранного вида в единице элементарного объёма пробных частиц определяется числом обратных соударений за единицу времени:

$$\Delta_{\alpha\beta}^{(+)} = \int f'_{\alpha} f_{\beta}^{0'} g' b' \cdot db' \cdot d\hat{\epsilon}' \cdot d^3\xi_{\beta}, \quad (3.19)$$

где штрихами помечены все параметры столкновений, относящиеся к состоянию частиц после столкновений.

При записи (3.19) используется обратимость движения отдельной частицы по времени. В элементарном объёме $d^3\xi_{\alpha}$ частицами выбранного вида окажутся те, которые до столкновения имели скорость $\bar{\xi}'_{\alpha}$. Это – следствие микроскопической обратимости: если в реальном времени частица до столкновения имела скорость $\bar{\xi}_{\alpha}$, то после столкновения она будет иметь скорость $\bar{\xi}'_{\alpha}$. Но если мысленно пустить время вспять (сделать реверсию), то движение пойдёт обратным путём, причём конечное состояние прямого движения будет начальным для обратного и наоборот. Поэтому с частицами выбранного вида станут те частицы, которые до столкновения имели скорость $\bar{\xi}'_{\alpha}$. Процедура обращения времени является умозрительной, она просто подтверждает возможность появления частиц выбранного вида и даёт возможность точно подсчитать быстроту такого процесса для соотношения (3.19). В реальном процессе в газе одновременно происходят и те столкновения, которые мы приняли за прямые, и те столкновения, которые мы назвали обратными. Для обратных столкновений процедура обращения движения позволяет точно установить ту скорость, которой должны обладать молекулы для учёта столкновения, приводящих к появлению частиц со скоростями $\bar{\xi}_{\alpha} \pm d\bar{\xi}_{\alpha}$. Здесь описана упрощённая операция обращения. Запись в (3.18) и в (3.19) локально-максвелловских функций распределения для полевых частиц устраняет необходимость уточнять координаты частиц, которые становятся частицами выбранного вида в результате обратных столкновений, что особенно важно для частиц с достаточно большими диаметрами столкновений.

Выражения (3.18), (3.19) отражают изменения f_{α} только в результате столкновений с частицами компонента β . В многокомпонентной смеси необходимо учесть столкновения с полевыми частицами всех компонентов, в том числе и с подобными пробным частицам. Подставляя (3.18), (3.19) в (3.15) произведя суммирование по всем номерам полевых частиц, получим кинетическое уравнение Больцмана-Лоренца:

$$\frac{\partial f_{\alpha}}{\partial t} + \bar{\xi}_{\alpha} \cdot \frac{\partial f_{\alpha}}{\partial \vec{r}} + \frac{\vec{F}_{\alpha}}{m_{\alpha}} \cdot \frac{\partial f_{\alpha}}{\partial \bar{\xi}_{\alpha}} = \sum_{\beta=1}^s \int (f'_{\alpha} f_{\beta}^{0'} - f_{\alpha} f_{\beta}^0) g b d b d \hat{\epsilon} d^3 \xi_{\beta}. \quad (3.20)$$

В этом уравнении на искомую функцию $f_{\alpha}(\bar{\xi}_{\alpha}, \vec{r}, t)$ действует и оператор дифференцирования (левая часть), и оператор интегрирования (правая часть). Такие уравнения называются интегро-дифференциальными уравнениями. Относительно правой части необходимо сделать следующие замечания. Видно, что интегрирование проводится по переменной $\bar{\xi}_{\beta}$, а аргументом искомой функции является скорость пробных частиц $\bar{\xi}_{\alpha}$. Скорости $\bar{\xi}_{\alpha}$ и $\bar{\xi}_{\beta}$ независимы, поэтому f_{α} в правой части можно вынести за интеграл.

Но относительно $f'_\alpha(\bar{\xi}, \bar{r}, t)$ после столкновения этого сказать нельзя, так как её аргументом является скорость после столкновения $\bar{\xi}'_\alpha$, которая определяется и $\bar{\xi}_\alpha$, и $\bar{\xi}_\beta$, т. е. зависит от них обеих.

Смесь газов описывается системой из уравнений Больцмана-Лоренца, записанных для каждого компонента смеси. Причём в каждом уравнении учитываются все столкновения, включая однородные (при $\alpha = \beta$). Для однородных столкновений необходимо отличать функции распределения пробных и полевых частиц, которые относятся к разным элементарным объёмам в геометрическом пространстве. В частности для неоднородного чистого (однокомпонентного) газа уравнение Больцмана-Лоренца запишется так:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \bar{\xi} \cdot \frac{\partial f}{\partial r} + \frac{\bar{F}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \bar{\xi}} = \int (f' f_1^{0'} - f f_1^0) g b db d\hat{e} d\bar{\xi}_1, \quad (3.21)$$

где f , f_1^- функции распределения пробных и полевых частиц,

$\bar{\xi}$, $\bar{\xi}_1^-$ скорости пробных и полевых частиц соответственно.

Решение кинетического уравнения в чистом газе или системы кинетических уравнений в смеси позволяет найти неравновесную функцию распределения. Через эту функцию будут определяться параметры состояния и коэффициенты переноса.

Лекции

по дисциплине: «Кинетическая теория газов»

Автор: канд. физ.-мат.наук, доцент

Абдуает Зайтович Айткожаев

Лекция 9, 10, 11, 12

Решение линейного кинетического уравнения

Как видно из вывода кинетического уравнения (3.20) и его вида, нахождение неравновесной функции распределения сводится к нахождению функции возмущения. Малость функции возмущения говорит о том, что главная часть неравновесной функции является локально-равновесная ее часть, поэтому решение кинетического уравнения можно искать в виде разложения неравновесной функции по некоторым величинам. Из наглядной элементарной теории видно, что главную роль в процессах переноса, которые и позволяет описать искомая неравновесная функция, является длина свободного пробега или время свободного пролета молекул. Поэтому искомую функцию будем представлять в виде разложения по временам свободного пролета молекул. Времена свободного пролета молекул затем будут найдены путем подстановки разложения в кинетическое уравнение и решения полученных в результате интегральных уравнений для этих времен.

Неравновесная функция распределения

Строгое рассмотрение процессов переноса в линейном приближении можно провести на основе решения кинетического уравнения (3.20). В общем случае эту систему уравнений решить не удаётся. К настоящему времени разработаны приближённые методы, которые дают интересные результаты. Ниже излагается метод, в котором существенно используются приёмы уже изложенной элементарной теории. При этом использовалось условие малости длин пробега и градиентов макропараметров.

Будем искать вид функции распределения в элементарном объёме d^3r_0 , имеющим радиус-вектор \vec{r}_0 . В этот объём из соседних объёмов будут прилетать частицы и будут сталкиваться в нём с частицами, которые в нём к тому времени уже находились (пребывали, были). Прилетевшие частицы описывались локально-равновесной функцией с параметрами, которые характерны для элементарных объёмов, из которых они прилетают. Так мы мысленно разбиваем газ на отдельные элементарные объёмы (домены), т. е. вводим зернистую структуру (иногда её называют целлюлярной структурой). Частицы выбранного вида проходят ряд последовательных локально-равновесных состояний – цепочку Маркова.

Кратко всё сказанное можно сформулировать так. Функция распределения, описывающая состояние в d^3r_0 около \vec{r}_0 отличается от равновесной за счёт того, что в этот элементарный объём прилетают частицы, равновесные для других элементарных объёмов. Различие функций распределения в соседних элементарных объёмах обусловлены различием макропараметров в этих объёмах.

При малых отклонениях от равновесия можно записать следующую связь между макропараметрами в соседних элементарных объёмах (доменах):

$$n_{\alpha_1} = n_{\alpha_0} - \tau_{\alpha} \vec{v}_{\alpha} \cdot \vec{\nabla} n_{\alpha}$$

$$T_1 = T_0 - \nu_{\alpha} \vec{v}_{\alpha} \cdot \vec{\nabla} T \quad (4.1)$$

$$\vec{W}_1 = \vec{W}_0 - \omega_{\alpha} \vec{v}_{\alpha} \cdot \vec{\nabla} \vec{W},$$

где нулём отмечены макропараметры, равновесные элементарном объёме около \vec{r}_0 , единицей - в соседнем, τ_α^- время свободного пролёта частиц выбранного вида, в течение которого они сохраняют свою принадлежность к начальному локально-равновесному состоянию, ν_α^- - время свободного пролёта как время, в течение которого группа рассматриваемых частиц сохраняется относительно температуры, ω_α^- время свободного пролёта как временной масштаб изменения скорости конвекции.

Соотношения (4.1) записаны для частиц выбранного вида. Эти частицы в пределах $d^3\vec{\xi}_\alpha$ имеют одинаковые скорости $\vec{\xi}_\alpha$, а значит и \vec{v}_α , так как в скорости $\vec{\xi}_\alpha$ содержится одинаковая для всех частиц скорость \vec{W} . Эти соотношения справедливы для частиц всех скоростных групп, но для каждой из них времена свободного пролёта будут своими. То значит, что они являются функциями скорости \vec{v}_α , т. е. $\tau_\alpha(v_\alpha)$, $\nu_\alpha(v_\alpha)$, $\omega_\alpha(v_\alpha)$. Вид этой функциональной зависимости можно установить, решив уравнение для них, которые можно получить из кинетического уравнения (3.20)

Возможно, что смысл выражений (4.1) будет более понятным, если использовать длину свободного пробега. Градиент макропараметра даёт изменение его в определённом направлении, приходящееся единицу длины, поэтому произведение его на длину свободного пробега даёт изменение макропараметра на этом расстоянии. Для каждого макропараметра вводится соответствующая длина свободного пробега как линейный масштаб его изменения.

Из сказанного следует, что неравновесная функция распределения для газа в элементарном объёме, имеющим радиус-вектор \vec{r}_0 , запишется как (2.14) с использованием для n_1 , T_1 , \vec{W}_1 их выражения через n_0 , T_0 , \vec{W}_0 в виде (4.1):

$$f_\alpha(\vec{\xi}_\alpha, \vec{r}, t) = \left[n_\alpha - \tau_\alpha \vec{v}_\alpha \cdot \vec{\nabla} n_\alpha \right] \left(\frac{m_\alpha}{2\pi k(T - \nu_\alpha \vec{v}_\alpha \cdot \vec{\nabla} T)} \right)^{3/2} e^{-\frac{m_\alpha [\vec{\xi}_\alpha - (\vec{W} - \omega_\alpha \vec{v}_\alpha \cdot \vec{\nabla} \vec{W})]^2}{2kT}} \quad (4.2)$$

В этом выражении индекс 0 около макропараметров опущен, так как рассмотренный нами элементарный объём около радиуса -вектора \vec{r}_0 был выбран произвольно, поэтому (4.2) будет справедливо для любого элементарного объёма.

В линейном приближении можно считать, что произведения длин свободного пробега (длина свободного пробега равна произведению времени свободного пролета на скорость) $\tau_\alpha \nu_\alpha$, $\nu_\alpha \nu_\alpha$, $\omega_\alpha \nu_\alpha$ на градиенты $\vec{\nabla} n_\alpha$, $\vec{\nabla} T$, $\vec{\nabla} \vec{W}$ малы по сравнению с макропараметрами. После преобразования (4.2) получим:

$$f_\alpha(\vec{\xi}_\alpha, \vec{r}, t) = f_\alpha^0 \left\{ 1 - \tau_\alpha \vec{v}_\alpha \cdot \vec{\nabla} \ln n_\alpha - \left(\frac{m_\alpha \nu_\alpha}{2kT} - \frac{3}{2} \right) \nu_\alpha \vec{v}_\alpha \cdot \vec{\nabla} \ln T - \frac{m_\alpha}{kT} \omega_\alpha \overleftrightarrow{\nu_\alpha \nu_\alpha} : \vec{\nabla} \vec{W} \right\}, \quad (4.3)$$

Отсюда следует, что функции возмущения выражается через градиенты макропараметров:

$$\phi_\alpha = -\tau_\alpha \vec{v}_\alpha \cdot \vec{K}_\alpha - Z_\alpha \nu_\alpha \vec{v}_\alpha \cdot \vec{\nabla} \ln T - 2\omega_\alpha \overleftrightarrow{H_\alpha H_\alpha} : \vec{\nabla} \vec{W}, \quad (4.4)$$

$$\vec{K}_\alpha \equiv \vec{\nabla} \ln x_\alpha + \vec{\nabla} \ln p - \vec{\nabla} \ln T;$$

$$Z_\alpha \equiv H^2 - \frac{3}{2},$$

$$\bar{H}_\alpha \equiv \frac{m_\alpha}{2kT} \bar{v}_\alpha.$$

Зависимость функции возмущения от скорости определяется этой зависимостью времён свободного пролёта $\tau(v)$, $v(v)$, $\omega(v)$. Чтобы установить явный вид зависимости времён свободного пролёта от скорости, подставим (4.3) и (4.4) в кинетическое уравнение (3.20). После этого будут получены уравнения для времён свободного пролёта, решение которых даст искомую зависимость времен свободного пролета от скорости молекул.

Интегральные уравнения для времён свободного пролёта

В предыдущем разделе получена равновесная функция распределения в виде выражения (4.3), которое содержит подлежащие определению времена свободного пролёта $\tau(v)$, $v(v)$, $\omega(v)$. Подстановка (4.3) в интегро-дифференциальное кинетическое уравнение Больцмана-Лоренца (3.20) даст интегральные уравнения для времён свободного пролёта.

Представим уравнение Больцмана-Лоренца в операторной форме:

$$\hat{D}f_\alpha = \sum_{\beta=1}^s J_{\alpha\beta}, \quad (4.5)$$

где левая часть представлена в виде потокового оператора (крышка над символом обозначает, что это оператор),

$$\hat{D}f_\alpha = \frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + \bar{\xi}_\alpha \cdot \bar{\nabla} f_\alpha, \quad (4.6)$$

а правая часть – в виде суммы интегралов столкновений Больцмана-Лоренца:

$$J_{\alpha\beta} = (f'_\alpha f_\beta^{0'} - f_\alpha f_\beta^0) gb \cdot db \cdot d\hat{\epsilon} \cdot d^3\bar{\xi}_\beta, \quad (4.7)$$

$$f_\alpha = f_\alpha^0 [1 + \phi_\alpha]. \quad (4.8)$$

По причине громоздкости предстоящих преобразований не будем отдельно рассматривать левую часть и правую часть (4.5), а приравняем их уже после упрощений. В результате получим интегральные уравнения для времён пролёта, которые будем решать методами, разработанными в современной строгой кинетической теории [3, 4]. Задача трудная, поэтому в настоящем пособии мы ограничимся приближением, в котором времена свободного пролёта принимаются независимыми от скорости. Это будет соответствовать первому приближению строгой кинетической теории.

Получение левой части уравнения (4.5)

Левая часть кинетического уравнения обычно не вызывает особых затруднений при решении. В этом параграфе будут описаны приёмы упрощения левой части в гидродинамическом приближении, которые в настоящее время широко используются [3, 4, 5]. В этом приближении левая часть будет приведена к потоковому оператору от локально-максвелловской функции распределения.

В предыдущем параграфе левая часть записана в виде (4.6). Подставляя в это выражение неравновесную функцию в виде (4.8) с учётом выражения для функции возмущения (4.4), получим:

$$\widehat{D}f_\alpha = \widehat{D}f_\alpha^0 + O(2), \quad (4.9)$$

где учтено, абсолютное отклонение функции возмущения от равновесия $f_\alpha^0 \phi_\alpha$ является величиной второго порядка малости $O(2)$, и производные от неё также являются величинами второго порядка:

$$\widehat{D}(f_\alpha^0 \phi_\alpha) = O(2). \quad (4.10)$$

Локально-максвелловская функция распределения $f_\alpha^0(\vec{\xi}_\alpha, \vec{r}, t)$ зависит от координаты \vec{r} и время через зависимость от них макропараметров: $n(\vec{r}, t)$, $T(\vec{r}, t)$. Вид левой части кинетического уравнения (4.6) показывает, что в левой части проводится дифференцирование $f_\alpha^0(\vec{\xi}_\alpha, \vec{r}, t)$ по независимым аргументам: $\vec{\xi}_\alpha$, \vec{r} , t . Для удобства применим широко используемый в кинетической теории приём и представим левую часть в виде:

$$\widehat{D}f_\alpha^0 = f_\alpha^0 \widehat{D}(\ln \cdot f_\alpha^0), \quad (4.11)$$

в котором использовано свойство производной от логарифмической функции:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_\alpha^0}{\partial t} &= f_\alpha^0 \frac{\partial \ln \cdot f_\alpha^0}{\partial t}, \\ \frac{\partial f_\alpha^0}{\partial \vec{r}} &= f_\alpha^0 \frac{\partial \ln \cdot f_\alpha^0}{\partial \vec{r}} = f_\alpha^0 \vec{\nabla} \ln \cdot f_\alpha^0. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Выражение (2.14) для локально-максвелловской функции распределения позволяет записать:

$$\ln f_\alpha^0 = \ln n_\alpha - \frac{3}{2} \ln T - \frac{m_\alpha (\vec{\xi}_\alpha - \vec{W})^2}{2kT} + \frac{3}{2} \ln \left(\frac{m_\alpha}{2\pi k} \right) = \ln n_\alpha - \frac{3}{2} \ln T - \frac{m_\alpha v_\alpha^2}{2kT} + \frac{3}{2} \ln \frac{m_\alpha}{2\pi k}. \quad (4.13)$$

Как уже отмечалось, аргументы функции распределения являются независимыми, но скорость теплового движения $\vec{v}_\alpha = \vec{\xi}_\alpha - \vec{W}$ зависит от времени и координаты через зависимость от них \vec{W} , поэтому:

$$\frac{\partial (\vec{\xi}_\alpha - \vec{W})^2}{\partial t} = -2\vec{v}_\alpha \cdot \frac{\partial \vec{W}}{\partial t}. \quad (4.14)$$

Выполним достаточно подробно дифференцирования по координате, для чего учтём выражение (4.13) для $\ln f_\alpha^0$. В результате получим:

$$\vec{\nabla} \ln f_\alpha^0 = \vec{\nabla} \ln n_\alpha + \left(\frac{m_\alpha v_\alpha^2}{2kT} - \frac{3}{2} \right) \vec{\nabla} \ln T + \frac{m_\alpha}{kT} \vec{v}_\alpha \cdot \overrightarrow{\nabla W}. \quad (4.15)$$

Скобка $\left(\frac{m_\alpha v_\alpha^2}{2kT} - \frac{3}{2} \right)$ будет неоднократно встречаться, поэтому для неё введём следующее обозначение:

$$Z_\alpha \equiv \left(\frac{m_\alpha v_\alpha^2}{2kT} - \frac{3}{2} \right). \quad (4.16)$$

Тогда выражение (4.14) запишется так:

$$\vec{\nabla} \ln f_\alpha^0 = \vec{\nabla} \ln n_\alpha + Z_\alpha \vec{\nabla} \ln T + \vec{H}_\alpha \cdot \overrightarrow{\nabla W}. \quad (4.17)$$

Относительно последнего члена необходимо сделать следующие замечания. Функция распределения является скаляром (тензор нулевого ранга), поэтому $\vec{\nabla} f_\alpha^0$ является градиентом от скаляра. Градиент представляет собой вектор, имеющий направление, по которому возрастание скаляра наибольшее. Таким свойством обладают градиенты от n_α и T . Градиент скорости $\overrightarrow{\nabla W}$ – это тензор второго ранга. Формально он образуется как диадик из двух векторов: векторного оператора набла $\vec{\nabla} \equiv \nabla_x \vec{i} + \nabla_y \vec{j} + \nabla_z \vec{k}$ и скорости $\vec{W} = W_x \vec{i} + W_y \vec{j} + W_z \vec{k}$. Диадик $\overrightarrow{\nabla W}$ имеет компоненты $\nabla_i W_j$. Чтобы записать матрицу компонентов, индексам i, j последовательно присваивают значения x, y, z .

Последний член в (4.17) представляет собой произведение вектора \vec{H} на тензор второго ранга $\overrightarrow{\nabla W}$. Чтобы результат представлял собой вектор, используется свёрнутое произведение, которое помечено точкой между сомножителями, говорящей о том, что один индекс тензорного компонента приравнивается индексу компонента вектора. В двукратной свёртке, применяемой в выражении (4.4), внутренние индексы компонента тензора приравниваются, поэтому между сомножителями поставлены две точки, а результат представляет собой скаляр, так как всегда по одинаковым индексам производится суммирование. В выражении (4.17) используется однократная свёртка, результатом которой получится вектор с компонентами $v_i \nabla_i W_k$.

Дифференцирование по времени проводится также, как и по координате, поэтому результат можно записать по аналогии:

$$\frac{\partial \ln f_\alpha^0}{\partial t} = \frac{\partial \ln n_\alpha}{\partial t} + Z_\alpha \frac{\partial \ln T}{\partial t} + \vec{H}_\alpha \cdot \frac{\partial \overrightarrow{\nabla W}}{\partial t}. \quad (4.18)$$

Частная производная по третьему аргументу $\vec{\xi}$ получается в таком виде:

$$\frac{\partial \ln f_\alpha^0}{\partial \vec{\xi}_\alpha} = - \frac{m_\alpha \vec{v}_\alpha}{kT}. \quad (4.19)$$

Таким образом, левая часть кинетического уравнения (4.5) в рассматриваемом приближении (4.9) запишется так:

$$\begin{aligned}
\widehat{D}f_\alpha = f_\alpha^0 \left\{ \frac{1}{n_\alpha} \frac{\partial n_\alpha}{\partial t} + \vec{H}_\alpha \cdot \frac{\partial \vec{W}}{\partial t} + Z_\alpha \frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial t} + \right. \\
\left. + (\vec{v}_\alpha + \vec{W}) \frac{1}{n_\alpha} \cdot \vec{\nabla} n_\alpha + \frac{m_\alpha}{kT} \overleftrightarrow{v_\alpha v_\alpha} : \overline{\vec{\nabla} W} + \vec{W} \cdot \vec{H}_\alpha \cdot \overline{\vec{\nabla} W} \right\} + \\
+ (\vec{v}_\alpha + \vec{W}) \cdot Z_\alpha \vec{\nabla} T + \vec{F}_\alpha \cdot \frac{\vec{v}_\alpha}{kT} \Bigg\}, \quad (4.20)
\end{aligned}$$

где $\overleftrightarrow{v_\alpha v_\alpha} : \overline{\vec{\nabla} W}$ – бискалярное произведение тензоров, дающее скаляр. Две точки обозначает двойную свёртку: $\overleftrightarrow{v v} : \overline{\vec{\nabla} W} = \sum_{i=1}^3 \cdot \sum_{j=1}^3 v_i v_j \nabla_j W_i$.

Как видно из (4.20), в левую часть входят производные по времени и по координате от макропараметров. Эти производные связаны уравнениями сохранения (3.10). В гидродинамическом приближении [3, 4] временные производные в (4.20) исключаются с помощью уравнений сохранения (3.10), в которых пренебрегается членами, содержащими необратимые потоки: \vec{J} , \vec{Q}^k , $\nabla_i W_j$. В этом приближении возникает трудность, связанная неинерциальностью системы отсчёта, что может привести к потере некоторых явлений. В настоящем пособии дано описание, в котором учитываются результаты элементарной теории, в которой не делается перехода в неинерциальную систему отсчёта, а гидродинамическое приближение используется только при нахождении времени свободного пролёта.

Таким образом, используя уравнения (3.10) без указанных членов для исключения временных производных в (4.20), получим:

$$\widehat{D}f_\alpha^0 = f_\alpha^0 \left\{ \vec{v}_\alpha \cdot \vec{\nabla} \ln x_\alpha + \left(\frac{m_\alpha v_\alpha^2}{2kT} - \frac{5}{2} \right) \vec{v}_\alpha \cdot \vec{\nabla} \ln T + \frac{m_\alpha}{kT} \overleftrightarrow{v_\alpha v_\alpha} : \overline{\vec{\nabla} W} + \frac{1}{x_\alpha} \vec{v}_\alpha \cdot \vec{d}_\alpha \right\}, \quad (4.21)$$

$$\text{где } \vec{d}_\alpha = \frac{\rho_\alpha}{\rho} \left(\vec{F}_\alpha - \sum_{\beta=1}^s \frac{\rho_\beta}{\rho} \vec{F}_\beta \right) - \left(x_\alpha - \frac{\rho_\alpha}{\rho} \right) \nabla \ln p,$$

здесь $\overline{\vec{\nabla} W}$ бездивергентный тензор градиента скорости, компоненты которого записываются так: $\nabla_i W_j - (1/3)(\nabla_i W_j)$. Аналогично, компоненты тензора $\overleftrightarrow{v_\alpha v_\alpha}$ записываются так: $v_{\alpha i} v_{\alpha j}$.

При получении (4.21) были использованы следующее очевидное соотношение:

$$\vec{\nabla} \ln n_\alpha = \vec{\nabla} \ln(n x_\alpha) = \vec{\nabla} \ln x_\alpha + \vec{\nabla} \ln n - \vec{\nabla} \ln x_\alpha + \vec{\nabla} \ln p - \vec{\nabla} \ln T. \quad (4.22)$$

Таким образом, левая часть кинетического уравнения показывает, что отклонения функции распределения от равновесной вызываются градиентами макропараметров.

Правая часть кинетического уравнения.

В правой части кинетического уравнения (4.4) учитываются столкновения пробных частиц с частицами всех компонентов смеси, поэтому она представлена в виде суммы парциальных интегралов столкновения Больцмана-Лоренца $J_{\alpha\beta}$. В дальнейшем удобнее рассмотреть парциальный интеграл столкновений, а суммирование провести уже после упрощений его, которые и будут проделаны ниже.

Рассмотрим парциальный интеграл столкновений, описывающие столкновения частиц под номером α с частицами под номером β :

$$J_{\alpha\beta} = \int (f'_\alpha f'_\beta - f_\alpha f_\beta) g_{\alpha\beta} b db d\hat{e} d^3\xi_\beta. \quad (4.23)$$

Подставим в это выражение неравновесную функцию распределения пробных частиц в виде $f_\alpha = f_\alpha^0 [1 + \phi_\alpha]$ и локально-максвелловскую функцию для полевых частиц. В результате получим:

$$J_{\alpha\beta} = \int [f_\alpha^0 f'_\beta (1 + \phi_\alpha) - f_\alpha f_\beta^0 (1 + \phi_\alpha)] g_{\alpha\beta} b db d\hat{e} d^3\xi_\beta. \quad (4.24)$$

Вид локально-максвелловских функций f_α^0 (2.14) показывает, что их произведение, входящее в (4.24), до столкновений равно их произведению после столкновений. Чтобы это показать, учтём, что аргументом f'_α является скорость $\bar{\xi}'_\alpha$ после столкновения частицы, имевшей скорость $\bar{\xi}_\alpha$ с частицей, имевшей до столкновения скорость $\bar{\xi}_\beta$. При упругом столкновении двух частиц в инерциальной системе отсчёта сохраняется суммарный импульс и кинетическая энергия:

$$m_\alpha \bar{\xi}_\alpha + m_\beta \bar{\xi}_\beta = m_\alpha \bar{\xi}'_\alpha + m_\beta \bar{\xi}'_\beta, \quad (4.25)$$

$$m_\alpha \xi_\alpha^2 + m_\beta \xi_\beta^2 = m_\alpha \xi_\alpha'^2 + m_\beta \xi_\beta'^2. \quad (4.26)$$

Если скорость конвекции \vec{W} постоянна или её изменение за время свободного пролёта пренебрежимо мало, то из этих соотношений можно получить соотношения для скорости теплового движения $\vec{v}_\alpha = \bar{\xi}_\alpha - \vec{W}$:

$$m_\alpha \vec{v}_\alpha + m_\beta \vec{v}_\beta = m_\alpha \vec{v}'_\alpha + m_\beta \vec{v}'_\beta, \quad (4.27)$$

$$m_\alpha v_\alpha^2 + m_\beta v_\beta^2 = m_\alpha v_\alpha'^2 + m_\beta v_\beta'^2.$$

Последнее равенство позволяет получить необходимое равенство:

$$f_\alpha^0 f_\beta^0 = f_\alpha^0 f_\beta^0, \quad (4.28)$$

так как выполняется следующее равенство:

$$e^{-\frac{m_\alpha v_\alpha^2}{2kT}} e^{-\frac{m_\beta v_\beta^2}{2kT}} = e^{-\frac{1}{2kT} (m_\alpha v_\alpha^2 + m_\beta v_\beta^2)}. \quad (4.29)$$

Подставляя (4.28) в (4.24) и произведя вычитание, получим парциальный интеграл столкновений в следующем виде:

$$J_{\alpha\beta} = \int f_{\alpha}^0 f_{\beta}^0 (\phi'_{\alpha} - \phi_{\alpha}) g b d b d \hat{e} d^3 \xi_{\beta}. \quad (4.30)$$

В рассматриваемом методе искомыми функциями скорости являются времена свободного пролёта $\tau(v)$, $v(v)$, $\omega(v)$. Через них выражается функция возмущения ϕ_{α} , поэтому следующим шагом будет подстановка выражения для ϕ_{α} в виде (4.4) в парциальный интеграл столкновений (4.30). В результате этого получим:

$$J_{\alpha\beta} = \int f_{\alpha}^0 f_{\beta}^0 \left\{ \bar{\nabla} \ln_{\alpha} (\bar{v}'_{\alpha} \tau'_{\alpha} - \bar{v}_{\alpha} \tau_{\alpha}) + \bar{\nabla} \ln T (\bar{v}_{\alpha} \tau_{\alpha} - \bar{v}'_{\alpha} \tau'_{\alpha} + \right. \\ \left. + Z'_{\alpha} v'_{\alpha} \bar{v}'_{\alpha} - Z_{\alpha} v_{\alpha} \bar{v}_{\alpha}) + \overline{\overline{\nabla W}} : \left(\overline{\overline{H_{\alpha} H_{\alpha} \omega_{\alpha}}} - \overline{\overline{H'_{\alpha} H'_{\alpha} \omega'_{\alpha}}} \right) + \right. \\ \left. + \vec{e} : \vec{c} \right\} k_{\alpha\beta} d\vec{k} \cdot d^3 \xi_{\beta}, \quad (4.31)$$

где для краткости введено обозначение: $g_{\alpha\beta} b d b d \hat{e} = k_{\alpha\beta} b \vec{k}$, и из тензора $\overline{\overline{\nabla W}}$ выделен некоторый тензор \vec{e} , так, чтобы множителем при скобке, содержащей времена свободного пролёта ω_{α} был бездивергентный тензор $\overline{\overline{\nabla W}}$. Кроме того, использовано следующее свойство бискалярного произведения тензоров. Если в таком произведении один из тензоров бездивергентный, то и второй можно считать бездивергентным, поэтому диадик из \vec{H} можно считать бездивергентным тензором $\overline{\overline{H H}}$.

Лекции

по дисциплине: «Кинетическая теория газов»

Автор: канд. физ.-мат.наук, доцент

Абдуает Заитович Айткожаев

Лекция 12, 13, 14, 15

Получение интегральных уравнений для времён свободного пролёта.

После того, как найдена левая части кинетического уравнения (4.5) в виде (4.21) и правая часть в виде суммы по β от (4.31), их необходимо приравнять. В результате получится очень громоздкое выражение, причём одно уравнение будет содержать три неизвестных: τ , v , ω . Для расщепления полученного уравнения на три – соответственно для τ , v и ω , применяется следующий приём.

Левая и правая части уравнения содержат градиенты макропараметров $\bar{\nabla} n_{\alpha}$, $\bar{\nabla} T$, $\overline{\overline{\nabla W}}$. Если приравнять члены, содержащие одинаковые градиенты в левой и в правой частях, а затем сократить на эти градиенты, то получим три уравнения:

$$f_{\alpha}^0 \bar{v}_{\alpha} = \sum_{\beta=1}^S \int f_{\alpha}^0 f_{\beta}^0 (\tau_{\alpha} \bar{v}_{\alpha} - \tau'_{\alpha} \bar{v}'_{\alpha}) k_{\alpha\beta} d\vec{k} d^3 \xi_{\beta}, \quad (4.32)$$

$$f_{\alpha}^0 \bar{v}_{\alpha} \left(H_{\alpha}^2 - \frac{5}{2} \right) = \sum_{\beta=1}^S \int f_{\alpha}^0 f_{\beta}^0 (\tau_{\alpha} \bar{v}_{\alpha} - \tau'_{\alpha} \bar{v}'_{\alpha} + Z'_{\alpha} v'_{\alpha} \bar{v}'_{\alpha} - Z_{\alpha} v_{\alpha} \bar{v}_{\alpha}) k_{\alpha\beta} d\vec{k} d^3 \xi_{\beta}, \quad (4.33)$$

$$f_{\alpha}^0 \overline{H_{\alpha} H_{\alpha}} = \sum_{\beta=1}^S \int f_{\alpha}^0 f_{\beta}^0 \left(\overline{H_{\alpha} H_{\alpha}} \omega_{\alpha} - \overline{H'_{\alpha} H'_{\alpha}} \omega'_{\alpha} \right) k_{\alpha\beta} d\bar{k} d^3 \xi_{\beta}. \quad (4.34)$$

Видно, что первое из этих уравнений содержит в качестве искомого функции только τ , второе v и третье — ω . Каждое из этих уравнений является интегральным уравнением. Они относятся к неоднородным интегральным уравнениям Фредгольма второго рода.

Уравнения для τ , v и ω можно получить не из общего уравнения (4.5), а рассматривая частные случаи. Например, уравнение для τ можно получить для стационарного $\partial/\partial t = 0$ при условии, что в смеси существует только $\bar{V}x_{\alpha}$. Аналогичные частные случаи приводят к уравнениям для v и ω . В современной кинетической теории принято исходить из общего случая. При этом приходится делать много допущений, в результате чего левая и правая части полученного общего уравнения могут содержать некоторые неопределяемые члены. В частности, такими членами в нашем рассмотрении будут члены, содержащие тензор $\bar{\epsilon}$. Одним из существенных моментов в рассматриваемом решении является и то, что уравнения получены приравниванием сомножителей в скалярных произведениях, оправданием которого является физический смысл.

Решение интегрального уравнения для τ_{α} методом последовательных приближений

Учитывая, что $H^2 = mv^2/(2kT)$, $d^3 \xi = d^3 v$, уравнение для τ_{α} в смеси можно записать в следующем виде:

$$f_{\alpha}^0 \bar{H}_{\alpha} = \sum_{\beta=1}^S \int f_{\alpha}^0 f_{\beta}^0 \left(\tau_{\alpha} \bar{H}_{\alpha} - \tau'_{\alpha} \bar{H}'_{\alpha} \right) g_{\alpha\beta} b db d\bar{\epsilon} d^3 v_{\beta}. \quad (4.35)$$

Анализ этого неоднородного интегрального уравнения показывает, что соответствующее ему однородное уравнение (без левой части) не имеет нетривиальных решений. В этом случае неоднородное уравнение (4.35) будет иметь единственное решение.

В кинетической теории газов, развитой Чепменом и Каулингом [3, 4, 12], для решения аналогичных интегральных уравнений был разработан метод представления искомой функции скорости в виде ряда из ортогональных полиномов Сонина-Лагерра. Эти полиномы определяются формулой:

$$S_p^m(x) = \sum_{j=0}^m \frac{(-x)^j (m+n)!}{(n+j)!(m-j)! j!}. \quad (4.36)$$

Для решения уравнения для времени свободного пролёта будут использованы полиномы с $n = 3/2$. Несколько первых таких полиномов запишутся так:

$$\begin{aligned} S_{3/2}^0(H^2) &= 1; & S_{3/2}^1(H^2) &= \frac{5}{2} - H^2; \\ S_{3/2}^2(H^2) &= \frac{35}{8} - \frac{7}{2} H^2 + \frac{1}{2} H^4. \end{aligned} \quad (4.37)$$

Искомая функция $\tau_\alpha(H_\alpha)$ представляется так:

$$\tau_\alpha(H_\alpha) = \sum_{r=0}^{\infty} \tau_\alpha(r) S_{3/2}^r(H_\alpha^2). \quad (4.38)$$

На практике обычно учитывается только один или два члена в этом разложении. При учёте только нулевого, равного единице, полинома получаются формулы для коэффициентов переноса в первом приближении. Во втором приближении получаются формулы при учёте двух полиномов. К настоящему времени для некоторых простых потенциалов взаимодействия получены формулы при учёте трёх полиномов — третье приближение. Однако для использования в практике такие формулы мало пригодны из-за громоздкости. Чтобы за громоздкими выражениями не потерять основные особенности применяемых приёмов, решим уравнение (4.35) в первом приближении.

Как видно из (4.38), первое приближение соответствует случаю, когда время свободного пролёта не зависит от скорости. Такой результат не лишён физического смысла. Зависимость τ_α от скорости определяется характером межмолекулярного взаимодействия, и при возможном многообразии этих взаимодействий может встретиться и принятый нами случай.

В первом приближении уравнение (4.35) запишется так:

$$f_\alpha^0 \vec{H}_\alpha = \sum_{\beta=1}^s \tau_\alpha(0) \int f_\alpha^0 f_\beta^0 (\vec{H}_\alpha - \vec{H}'_\alpha) g_{\alpha\beta} b db d\hat{e} d^3 v_\beta, \quad (4.39)$$

где $\tau_\alpha(0)$ — первое приближение для времени свободного пролёта молекул компонента α в смеси из s компонентов.

Полученное уравнение уже не является интегральным относительно $\tau_\alpha(0)$, оно решается следующим образом. Умножим скалярно левую и правую части (4.39) на \vec{H}_α и проинтегрируем по скоростям пробных частиц:

$$\int f_\alpha^0 H_\alpha^2 d^3 v_\alpha = \sum_{\beta=1}^s \tau_\alpha(0) \int f_\alpha^0 f_\beta^0 (\vec{H}_\alpha - \vec{H}'_\alpha) \cdot \vec{H}_\alpha g_{\alpha\beta} b db d\hat{e} d^3 v_\alpha d^3 v_\beta, \quad (4.40)$$

Относительно записи подобных уравнений необходимо сделать замечание. В кинетической теории принято одним символом \int обозначать несколько интегралов, количество которых нетрудно установить по тем переменным, для которых записаны дифференциалы. Так, в правой части (4.40) подразумевается восьмикратный интеграл по следующим переменным: $dv_x dv_y dv_z dv_{\beta_x} dv_{\beta_y} dv_{\beta_z} db d\hat{e}$. В левой части — трёхкратный интеграл по трём составляющим скорости с пределами интегрирования от $-\infty$ до $+\infty$. Обычно в таких интегралах используется тождество $d^3 v = 4\pi v^2 dv$, которое является следствием интегрирования по всем направлениям скорости — от 0 до ∞ . С учётом этого, левая часть представляет собой табличный интеграл, содержащий экспоненту.

Типичной для кинетической теории является правая часть. Отличие скорости после столкновения \vec{H}'_α от скорости до столкновения \vec{H}_α определяется динамикой парного столкновения, которая в свою очередь зависит от характера взаимодействия частиц. В общем случае такого взаимодействия интеграл в правой части аналитически не берётся. Чепмен и Каулинг [3, 4, 12] ввели специальные обозначения — так называемые

интегральные скобки, через которые будет выражаться результат. Самая простая интегральная скобка записывается так:

$$\left[\vec{H}_\alpha \vec{H}_\alpha \right]_{\alpha\beta} = \frac{1}{n_\alpha n_\beta} \int f_\alpha^0 f_\beta^0 (\vec{H}_\alpha - \vec{H}'_\alpha) \cdot \vec{H}'_\alpha g b d b d \hat{\epsilon} d^3 v_\alpha d^3 v_\beta. \quad (4.41)$$

С использованием этой скобки уравнение (4.40) запишется так:

$$\frac{3}{2} = \tau_\alpha(0) \sum_{\beta=1}^s n_\beta \left[\vec{H}_\alpha \vec{H}_\alpha \right]_{\alpha\beta}. \quad (4.42)$$

Искомая величина через интегральную скобку представляется так:

$$\tau_\alpha(0) = \frac{3}{2 \sum_{\beta=1}^s n_\beta \left[\vec{H}_\alpha \vec{H}_\alpha \right]_{\alpha\beta}}. \quad (4.43)$$

Интегральная скобка содержит сведения о характере взаимодействия при столкновениях, поэтому узловой проблемой является получение явного выражения её через параметры потенциала взаимодействия молекул. Для твёрдых сферических молекул эта задача решается аналитически. Для более сложных потенциалов скобка приводится к интегралам, которые находятся численно [3, 4, 12]. Введённая в (4.41) парциальная скобка через омега-интеграл $\Omega_{\alpha\beta}^{1,1}$ выражается так [3, 4, 12]:

$$\left[\vec{H}_\alpha, \vec{H}_\alpha \right]_{\alpha\beta} = 8 M_{\beta\alpha} \Omega_{\alpha\beta}^{1,1}. \quad (4.44)$$

Тогда время свободного пролета в первом приближении выражается так:

$$\tau_\alpha(0) = \frac{3}{16 \sum_{\beta=1}^s n_\beta \Omega_{\alpha\beta}^{1,1} \frac{m_\beta}{m_\alpha + m_\beta}}, \quad (4.45)$$

где m_α – масса молекул.

Через время свободного пролета τ в дальнейшем будет выражаться коэффициент диффузии. Для вычислений трудно использовать интегралы Ω , поэтому их выражают через безразмерные, так называемые звездочные интегралы столкновений $\Omega_{\alpha\beta}^{l,s*}$, для которых существуют таблицы [3, 4]

Безразмерные интегралы получаются путем выбора в качестве масштаба интеграл столкновений для модели твердых сфер, для которой все интегралы берутся аналитически. В общем случае безразмерный звездочный интеграл вводится так [3]:

$$\Omega_{\alpha\beta}^{l,s*} = \frac{\Omega_{\alpha\beta}^{l,s}}{\Omega_{\alpha\beta}^{l,s}(R)}; \quad (4.46)$$

$$\Omega_{\alpha\beta}^{l,s*}(R) = \sqrt{\frac{kT}{2\pi m_\beta M_{\alpha\beta}}} \frac{1}{2} (l+1)! \left[1 - \frac{1}{2} \frac{1+(-1)^l}{1+l} \right] \pi \sigma_{\alpha\beta}^2, \quad (4.47)$$

$\Omega_{\alpha\beta}^{l,s}(R)$ - интеграл столкновений для потенциала твердых сфер, который выражается через диаметр твердых сфер $\sigma_{\alpha\beta}$.

Таким образом, для диффузионного времени свободного пролета молекул компонента α в s - компонентной смеси в первом приближении получается следующая формула:

$$\tau_{\alpha}(0) = \frac{3}{16 \sum_{\beta=1}^s n_{\beta} M_{\beta\alpha} \sigma_{\alpha\beta}^2 \Omega_{\alpha\beta}^{1,1*}} \sqrt{\frac{\pi k T (m_{\alpha} + m_{\beta})}{2 m_{\alpha} m_{\beta}}} . \quad (4.48)$$

Решение интегральных уравнений для V и Ω .

Время свободного пролёта v войдёт в коэффициент термодиффузии и теплопроводности, а ω – в коэффициент вязкости. Как отмечалось в предыдущем параграфе, первое приближение для коэффициентов переноса соответствует независимости времён пролёта от скорости.

Для нахождения первого приближения для времени свободного пролёта $v_\alpha(0)$ уравнение (4.33) умножим на \vec{H}_α и проинтегрируем в пространстве скоростей пробных частиц. В результате получим связь между $v_\alpha(0)$ и $\tau_\alpha(0)$:

$$v_\alpha(0) = \tau_\alpha(0) \frac{2 \sum_{\beta} n_{\beta} M_{\beta\alpha} \Omega_{\alpha\beta}^{11}}{\sum_{\beta=1}^s n_{\beta} M_{\beta\alpha} \left[(5M_{\alpha\beta} - 3) \Omega_{\alpha\beta}^{11} + 2M_{\beta\alpha} \Omega_{\alpha\beta}^{12} \right]}. \quad (4.49)$$

Уравнение для $\omega_\alpha(0)$ (4.34) в первом приближении запишется так:

$$f_\alpha^0 \overline{\overline{H_\alpha H_\alpha}} = \omega_\alpha(0) \sum \int f_\alpha^0 f_\beta^0 \left(\overline{\overline{H_\alpha H_\alpha}} - \overline{\overline{H'_\alpha H'_\alpha}} \right) k d\vec{k} d^3 v_\beta. \quad (4.50)$$

Умножая это уравнение бискалярно на бездивергентный тензор $\overline{\overline{H_\alpha H_\alpha}}$ и интегрируя по $d^3 v_\alpha$, получим:

$$\omega_\alpha(0) = \frac{5/2}{\sum_{\beta=1}^s n_{\beta} \left(\frac{80}{3} M_{\alpha\beta} M_{\beta\alpha} \Omega_{\alpha\beta}^{11} + 8M_{\beta\alpha}^2 \Omega_{\alpha\beta}^{22} \right)}. \quad (4.51)$$

Диффузия, бародиффузия и термодиффузия газов

Процессы переноса описываются потоками соответствующих молекулярных признаков. Диффузия описывается количеством частиц, которые за единичный интервал времени переносятся через единицу площади контрольной поверхности. Эту величину принято называть поверхностной плотностью потока частиц. Поверхностная плотность потока частиц α – компонента смеси в лабораторной системе отсчёта через неравновесную функцию распределения определяется так:

$$\vec{\Gamma}_\alpha = \int \vec{\xi}_\alpha f_\alpha d^3 v_\alpha = \int (\vec{W} + \vec{v}_\alpha) f_\alpha^0 [1 + \phi_\alpha] d^3 v_\alpha = \vec{W} n_\alpha + \vec{j}_\alpha. \quad (4.52)$$

Используя явное выражение функции возмущения ϕ_α через времена свободного пролёта (4.4), в первом приближении получим:

$$\begin{aligned} \vec{\Gamma}_\alpha = \vec{W} \int f_\alpha^0 d^3 v_\alpha - (\vec{\nabla} \ln x_\alpha + \vec{\nabla} \ln p) \tau_\alpha(0) \int f_\alpha^0 \vec{v}_\alpha d^3 v_\alpha + \\ + \vec{\nabla} \ln T \tau_\alpha(0) \left(\int f_\alpha^0 \vec{v}_\alpha d^3 v_\alpha - v_\alpha(0) / \tau_\alpha(0) \int f_\alpha^0 \vec{v}_\alpha Z_\alpha d^3 v_\alpha \right) = \end{aligned} \quad (4.53)$$

$$= \bar{W}n_\alpha - (\bar{\nabla} \ln x_\alpha + \bar{\nabla} \ln p) \frac{\tau_\alpha(0)}{3} \int f_\alpha^0 v_\alpha^2 d^3 v_\alpha + \bar{\nabla} \ln T (1 - v_\alpha(0)/\tau_\alpha(0)) \tau_\alpha(0) \frac{1}{3} \int f_\alpha^0 v_\alpha^2 d^3 v_\alpha.$$

Как видно из этого выражения, наблюдаемый поток молекул в лабораторной системе отсчета имеет составляющую обратимой природы $\bar{W}n_\alpha$ и составляющие необратимой природы. Составляющие необратимой природы пропорциональны градиентам соответствующих макропараметров. Обычная или концентрационная диффузия пропорциональна градиенту концентрации $\bar{\nabla} x_\alpha$ ($\bar{\nabla} \ln x_\alpha = \frac{1}{x_\alpha} \bar{\nabla} x_\alpha$).

Бародиффузия пропорциональна градиенту статического давления $\bar{\nabla} p$. Термодиффузия, поток которой пропорционален градиенту температуры $\bar{\nabla} T$. Составляющие необратимой природы имеют структуру закона Фика: поток пропорционален градиенту с соответствующим коэффициентом переноса в качестве коэффициента пропорциональности. Это говорит о том, что величины, на которые умножаются соответствующие градиенты являются коэффициентами переноса. Из (4.53) видно, что коэффициенты переноса представляют собой произведение времени свободного пролета на момент от квадрата скорости теплового движения.

Формулы для истинных коэффициентов диффузии D_α и коэффициента термодиффузии D_α^T также имеют структуру, аналогичную соответствующим формулам, полученным в предыдущих главах в рамках элементарной теории. Через времена свободного пролёта в первом приближении $\tau_\alpha(0)$ и $v_\alpha(0)$ выражается первое приближение для коэффициента диффузии:

$$[D_\alpha]_1 = \tau_\alpha(0) kT / m_\alpha, \quad (4.54)$$

и коэффициента термодиффузии:

$$[D_\alpha^T]_1 = [D_\alpha]_1 [1 - v_\alpha(0)/\tau_\alpha(0)]. \quad (4.55)$$

В соответствии с конститутивным соотношением для диффузии, поток $\bar{\Gamma}_\alpha$ с учётом (4.53) через введённые коэффициенты запишется так:

$$\bar{\Gamma}_\alpha = \bar{W}n_\alpha - n_\alpha D_\alpha \bar{\nabla} \ln x_\alpha - n_\alpha D_\alpha \bar{\nabla} \ln p + n_\alpha D_\alpha^T \bar{\nabla} \ln T. \quad (4.56)$$

Таким образом, через введенные коэффициенты переноса поток приобрел структуру закона Фика с учетом кроме конвективной составляющей $\bar{W}n_\alpha$ и составляющих необратимой природы. Из вывода этого выражения можно увидеть природу этих составляющих потока. Интегрирование по скорости дает разницу в количестве частиц, пересекающих контрольную площадку во встречных направлениях. Это – то же самое, что и подсчет этого количества в элементарной теории [1]. Из полученного выражения видно, что термодиффузионный поток каждого компонента смеси направлен из холодной области в более нагретую. Наблюдаемое термодиффузионное разделение в смеси обусловлено тем, что разные компоненты имеют разный коэффициент термодиффузии. Обычно больший коэффициент термодиффузии бывает у компонента, имеющего меньшую массу молекул, поэтому этот компонент опережает другие и это приводит к обогащению легким компонентом нагретой области. Формула применима и к газу, состоящему из одинаковых молекул. В этом случае в замкнутом устройстве поток

молекул из холодной области приведет к повышенному давлению в горячей области, что наблюдается как термодиффузионный бароэффект.

Аналогичная картина наблюдается и в поле неоднородного статического давления. Все компоненты смеси устремляются в область пониженного давления с разными скоростями. Обычно поток бародиффузии значительно меньше течения, которое также возникает под действием градиента статического давления. Но в таких устройствах, как центрифуга или в атмосфере Земли градиент статического давления существует, поэтому наблюдается и бародиффузия. В смесях это создает сдвиг концентрации – бародиффузионное разделение. В чистом газе бародиффузия проявляется через бародиффузионный термоэффект, так как молекулы, принадлежащие разным скоростным группам имеют разную подвижность.

Используя выражения для времён свободного пролёта через звёздочные интегралы Ω^* [3], получим формулы, по которым удобно производить вычисления. В международной системе единиц СИ формула для истинного коэффициента диффузии запишется так:

$$[D_{\alpha}]_1 = \frac{aT^{3/2}}{p \sum_{\beta=1}^s x_{\beta} \alpha_{\alpha\beta}}; \quad (4.57)$$

$$\alpha_{\alpha\beta} = \sqrt{\frac{2M_{\alpha}M_{\beta}}{M_{\alpha} + M_{\beta}}} \cdot \sigma_{\alpha\beta}^2 \Omega_{\alpha\beta}^{11*},$$

где $x_{\beta} = n_{\beta}/n$ – числовая доля молекул компонента под номером α или числовая концентрация (безразмерная величина),

M – масса киломоля (здесь эта величина обозначена большой греческой буквой «мю», кг · кмоль⁻¹. В этих формулах используется молярная масса в таких единицах, чтобы было удобно пользоваться таблицей Менделеева: там приведены величины, численно равные такой молярной массе),

$$M_{\alpha\beta} = \frac{M_{\alpha}}{M_{\alpha} + M_{\beta}} \quad \text{– приведенная масса (безразмерная величина, поэтому ее можно}$$

выражать и через массу молекул, и через молярные массы),

T – температура, К,

p – давление, Па,

σ – диаметры твёрдых сфер, м,

размерный числовой коэффициент $a = 26635 \cdot 10^{-26}$ (Дж^{3/2} К^{-3/2} кмоль^{-1/2}).

Формула для коэффициента диффузии термодиффузии данного компонента имеет такой вид:

$$[D_{\alpha}^T]_1 = \frac{aT^{3/2} p^{-1}}{\sum_{\beta=1}^s x_{\beta} \alpha_{\alpha\beta}} - \frac{aT^{3/2}}{\sum_{\beta=1}^s x_{\beta} \alpha_{\alpha\beta} \left(5M_{\alpha\beta} - 3 + 6M_{\beta\alpha} \Omega_{\alpha\beta}^{12*} / \Omega_{\alpha\beta}^{11*} \right)}. \quad (4.58)$$

Приведенные формулы применимы и к чистому газу. В этом случае истинный коэффициент диффузии переходит в коэффициент самодиффузии D_{11} , а коэффициент

термодиффузии – в коэффициент термосамодиффузии. Бародиффузия в чистом газе описывается коэффициентом самодиффузии.

Для двухкомпонентной смеси взаимное движение двух газов, происходящее в замкнутом приборе, удобно описывать разностью средних скоростей:

$$\frac{1}{n_1} \int \bar{\xi}_1 f_1 d^3 \xi_1 - \frac{1}{n_2} \int \bar{\xi}_2 f_2 d^3 \xi_2 = -[D_{12}]_1 \frac{1}{x_1 x_2} (\bar{v} x_1 + x_1 x_2 \alpha_p \bar{v} \ln p + x_1 x_2 \alpha_T \bar{v} \ln T), \quad (4.59)$$

где введён коэффициент взаимной диффузии, для которого справедлива формула Мейера в первом приближении:

$$[D_{12}]_1 = x_1 [D_2]_1 + x_2 [D_1]_1. \quad (4.60)$$

Относительное движение из-за бародиффузии характеризуется бародиффузионной постоянной:

$$[\alpha_p] = ([D_1]_1 - [D_2]_1) / [D_{12}]_1. \quad (4.61)$$

Термодиффузия в этом случае характеризуется термодиффузионным фактором:

$$[\alpha_T]_1 = ([D_1^T]_1 - [D_2^T]_1) / [D_{12}]_1. \quad (4.62)$$

Вычисления по этим формулам показали, что они правильно отражают основные особенности наблюдаемых процессов разделения в смесях и бароэффекты в как в смесях, так и в чистых газах.

Наглядная картина возникновения потока позволяет получить микроскопическую модель появления необратимости. Для определения потока мы следили за частицами выбранного вида. Если мысленно пустить время вспять ($t = -t'$), то скорости всех этих частиц повернутся на 180° ($\bar{\xi}(-t) = -\bar{\xi}(t)$). Но в рассматриваемом элементарном объёме много других молекул, поэтому среди них всегда найдутся такие, у которых скорость до реверсии была $\bar{\xi}$. Эти молекулы заменят повернувшие назад и станут при обратном течении времени частицами выбранного вида. Поэтому все процессы, обусловленные неодинаковостью числа частиц и скоростью теплового хаотического движения, пересекающих контрольную площадку во встречных направлениях, не изменяются и после обращения времени (после реверсии).

Такое наглядное объяснение выявляет две существенные особенности процессов. Во-первых, в элементарном объёме должно быть достаточно много частиц, чтобы всем частицам выбранного вида нашлась соответствующая замена. Во-вторых, в пределах элементарного объёма должно быть локальное равновесие. Только в этом случае в его пределах распределение по скоростям будет симметричным, что также обеспечит необходимую замену для частиц всех скоростных групп. Кроме того, как в прямом, так и в обратном процессе после пересечения контрольной площадки частицы не должны все возвращаться назад после столкновения. Они должны прийти в равновесие, соответствующее новым макропараметрам и только после этого участвовать в следующем шаге наравне со всеми частицами. Последнее обстоятельство формулируется как условие марковости цепочки. Оно учитывается в кинетическом уравнении Больцмана-Лоренца (4.5) тем, что функции распределения полевых частиц принимаются локально-максвелловскими.

Вязкость и теплопроводность

В современной кинетической теории тензор напряжений получается в общем виде [3, 4, 12] .:

$$\vec{P} = p\vec{I} + \vec{P}^{(1)}. \quad (4.63)$$

Тензор вязких напряжений для разреженных газов выражается только через коэффициент сдвиговой вязкости η (объёмная вязкость принимается равной нулю), и конститутивное соотношение записывается так

$$\vec{P}^{(1)} = -2\eta\vec{S}, \quad (4.64)$$

где \vec{S} симметричный тензор скоростей сдвига [3, 4] :

$$\vec{S} = \frac{1}{2} \left(\overline{\nabla W} + \overline{\nabla W}^+ \right), \quad (4.65)$$

где $\overline{\nabla W}^+$ –транспонированный тензор, образованный из $\overline{\nabla W}$ путём смены местами в его матрице строк и столбцов.

Функция распределения подчиняется таким нормировкам, чтобы момент второго порядка (3.9) совпадал с тензором напряжений. Через неравновесную функцию распределения это соотношение для смеси можно записать так:

$$\vec{P} = \sum_{\alpha=1}^S m_{\alpha} \int \overrightarrow{v_{\alpha} v_{\alpha}} f_{\alpha}^0 [1 + \phi_{\alpha}] d^3 v_{\alpha} = p\vec{I} + \vec{P}^{(1)}, \quad (4.66)$$

$$\vec{P}^{(1)} = \sum_{\alpha=1}^S m_{\alpha} \int \overrightarrow{v_{\alpha} v_{\alpha}} f_{\alpha}^0 \phi_{\alpha} d^3 v_{\alpha}. \quad (4.67)$$

Подставляя в (4.67) выражение (4.4) для функции возмущения ϕ_{α} , получим:

$$\begin{aligned} \vec{P}^{(1)} &= \sum_{\alpha=1}^S \frac{m_{\alpha}}{kT} \omega_{\alpha}(0) \int \overrightarrow{v_{\alpha} v_{\alpha}} \vec{v}_{\alpha} \vec{v}_{\alpha} f_{\alpha}^0 d^3 v_{\alpha} : \overline{\nabla W} = \\ &= \sum_{\alpha=1}^S \frac{m_{\alpha}}{kT} \omega_{\alpha}(0) \frac{2}{15} \int v_{\alpha}^4 f_{\alpha}^0 d^3 v_{\alpha} \overline{\nabla W} = 2 \sum_{\alpha=1}^S n_{\alpha} kT \omega_{\alpha}(0) \overline{\nabla W}. \end{aligned} \quad (4.68)$$

Учитывая, что для большинства газов обычно $\overline{\nabla W}$ представляет собой симметричный тензор, и $\overline{\nabla W} = \vec{S}$, из сравнения (4.68) с (4.64) получим следующую формулу для коэффициента вязкости смеси в первом приближении:

$$[\eta]_l = \sum_{\alpha=1}^S \frac{h\sqrt{T} \cdot x_{\alpha}}{\sum_{\beta=1}^S x_{\beta} \sigma_{\alpha\beta} \sqrt{\frac{2M_{\beta\alpha}}{\mu_{\alpha}} (5M_{\alpha\beta} \Omega_{\alpha\beta}^{11*} + 3M_{\beta\alpha} \Omega_{\alpha\beta}^{22*})}}. \quad (4.69)$$

Как и в формуле для коэффициента диффузии (4.57), в этой формуле используются все величины в СИ. Если молярная масса измеряется в кг/кмоль (в этом случае её

значение численно равно относительной молекулярной массе, которая находится по таблице Менделеева), то размерный коэффициент $h = 8009 \cdot 10^{-29} \text{ Дж}^{1/2} \text{ кмоль}^{1/2} \text{ К}^{-1/2}$. Если же используется μ , измеряемая в кг/моль, то числовой размерный множитель будет таким: $h = 2532,6 \cdot 10^{-22} \text{ Дж}^{1/2} \text{ моль}^{1/2} \text{ К}^{1/2}$.

Для потенциала твёрдых сфер все звёздочные интегралы равны единице, поэтому формула для коэффициента вязкости упрощается. Если газ состоит из одного компонента, то формула (4.69) запишется так:

$$[\eta]_1 = \frac{0,2344}{\sigma_{11}^2} \sqrt{\frac{m_1 k T}{\pi}}. \quad (4.70)$$

Сравнение с формулой, полученной в элементарной теории, показывает, что они различаются численным коэффициентом. Здесь надо иметь в виду, что при вычислении диаметров столкновений по измеренным коэффициентам переноса различие в коэффициентах приведёт к различию в значениях диаметров столкновений. В связи с этим, рекомендуется использовать найденные диаметры столкновений в рамках единой теории. Так, если используются диаметры, найденные по коэффициенту вязкости для вычислений коэффициента самодиффузии или термодиффузии, то обоснованным будет такое применение к формулам (4.70) и (4.57). Если расчёты делаются по формулам элементарной теории, то надо использовать все формулы в рамках этой теории.

Для получения формулы в высших приближениях искомое время свободного пролёта $\omega(v)$ представляют в виде ряда из полиномов (4.36) с $n = 5/2$:

$$\omega_\alpha(H_\alpha) = \sum_{r=0}^{s-1} b_\alpha^r(S) S_{5/2}^r(H_\alpha^2), \quad (4.71)$$

и представляют в интегральное уравнение (4.34). Выбор $n = 5/2$ обусловлен тем, что в этом уравнении именно для таких полиномов можно использовать их ортогональность.

Во втором приближении ряд (4.71) записывается так:

$$\omega_\alpha(v_\alpha) = b_\alpha^0(2) + b_\alpha^1(2) S_{5/2}^1(H_\alpha^2). \quad (4.72)$$

Видно, что при $s = 1$ получим $\omega_\alpha(0) = b_\alpha^0(1)$, и это приведёт к первому приближению для коэффициента вязкости. Во втором приближении коэффициент вязкости выражается через первое приближение и поправку:

$$[\eta]_2 = \sum_{\alpha=1}^s [\eta_\alpha]_2 = \sum_{\alpha=1}^s [\eta_\alpha]_1 \frac{1}{1 - \Delta_\alpha^n(2)}, \quad (4.73)$$

где $\Delta_\alpha^n(2)$ – вязкостная поправка для второго приближения. Выражение для этой простейшей поправки громоздко, приводиться не будет.

Для чистого газа из твёрдых сферических молекул эта формула даёт соотношение:

$$[\eta]_2 = 1,0117 [\eta]_1, \quad (4.74)$$

из которого видно, что второе приближение не сильно отличается от первого. То же можно сказать и о следующих приближениях. Однако при использовании подобных

формул для точных расчётов параметров межмолекулярного взаимодействия такая разница уже должна учитываться.

Как уже отмечалось, различие в числовых коэффициентах приводит к различию в диаметрах столкновений, полученных по этим формулам. В связи с этим, к прежнему предложению использовать σ в рамках единой теории, в строгой теории необходимо добавить $\bar{\sigma}$ и в рамках одного приближения. Как видно из предыдущего параграфа, термодиффузия в нашем рассмотрении описывается в первом приближении. В других теориях, например, в теории Чепмена-Энскога [3, 4, 12] термодиффузия появляется только при учёте двух членов в разложении по полиномам Сонина-Лагерра. Таким образом, возникает проблема обоснованного использования параметров межмолекулярного взаимодействия, полученных в различных приближениях строгой теории.

В элементарной теории поток термодиффузии приводит к трудности при выяснении молекулярной картины возникновения теплового потока. Из соотношения (4.56) видно, что теория, основанная на решении кинетического уравнения Больцмана-Лоренца также приводит к существованию потока термосамодиффузии, что усложняет наглядное объяснение механизма возникновения теплового потока даже в простом случае чистого газа. Как и в элементарной теории, для описания неизотермического случая введены времена свободного пролёта τ и ν . Будем считать, что наблюдаемый тепловой поток представляет собой поток избыточной по отношению к координате контрольной площадке энтальпии. Временным масштабом изменения плотности числа частиц при переходе рассматриваемой группы частиц через контрольную площадку является время пролета частиц τ , а температуры – время пролета ν . Тогда выражение для наблюдаемого теплового потока в смеси газов запишется так:

$$\bar{Q} = -\sum_{\alpha=1}^S \frac{1}{3} \bar{v} T \int m_{\alpha} v_{\alpha}^2 f_{\alpha} [v_{\alpha} c_{\nu\alpha} + \tau_{\alpha} (c_{p\alpha} - c_{\nu\alpha})] d^3 v_{\alpha} + \bar{W} \sum_{\alpha=1}^S \bar{v} T m_{\alpha} c_{p\alpha} \int f_{\alpha} \tau_{\alpha} \bar{v}_{\alpha} d^3 v_{\alpha}, \quad (4.75)$$

где $c_{p\alpha}$, $c_{\nu\alpha}$ – соответственно изобарная и изохорная удельные теплоёмкости компонента смеси. Множитель $1/3$ появился из-за того, что было произведено усреднение по направлениям скорости.

В замкнутом устройстве установившемся режиме скорость конвективного движения \bar{W} в неизотермических условиях будет определяться термодиффузионным потоком, что следует из условия $\sum_{\alpha} \bar{\Gamma}_{\alpha} = 0$ с использованием выражения (4.66) для потока $\bar{\Gamma}_{\alpha}$ поэтому второй член в (4.75) будет величиной второго порядка малости при малых градиентах. В первом приближении в (4.75) можно подставить $v_{\alpha}(0)$ и $\tau_{\alpha}(0)$ и провести интегрирование. Сравнение полученного выражения с законом Фурье для теплового потока даёт следующую формулу для коэффициента теплопроводности смеси в первом приближении:

$$[\lambda]_1 = \sum_{\alpha=1}^S n_{\alpha} k T c_{\nu\alpha} \tau_{\alpha}(0) [v_{\alpha}(0)/\tau_{\alpha}(0) + \gamma_{\alpha} - 1]. \quad (4.76)$$

Для чистого газа эту формулу можно записать так:

$$[\lambda]_1 = t \frac{i}{\sigma^2 \Omega^{11*}} \sqrt{\frac{T}{\mu}} [v(0)/\tau(0) + \gamma - 1], \quad (4.77)$$

где численный коэффициент в Международной системе СИ, $t = 13318 \cdot 10^{-26}$ Дж^{3/2} кмоль^{-1/2} К^{-3/2}, i – число степеней свободы частиц (структурных элементов данного процесса), μ – масса киломоля (кг/ кмоль), σ – диаметр твёрдых сфер, Ω^* – приведённый интеграл столкновений.

Анализ формулы (4.77) значительно упрощается, если принять, $v(0)/\tau(0) = 1$. Явный вид для $v(0)$ и $\tau(0)$ допускает такое приближение. После этого формула (4.77), как и формула элементарной теории, переходит в больцмановскую формулу для коэффициента теплопроводности; если в ней заменить c_v на теплоёмкость c_p , соответствующую изобарному процессу измерения теплового потока.

Из полученных формул видно, что коэффициенты вязкости и теплопроводности идеальных газов не зависят от давления. Эксперименты показали, что в тех условиях, когда газ можно считать идеальным такой вывод подтверждается. В своё время этот вывод казался парадоксальным, и после экспериментального подтверждения доверие к кинетической теории возросло.

Одно из существенных достижений кинетической теории заключается в том, что коэффициенты переноса при различных условиях можно вычислять, если известны параметры межмолекулярного взаимодействия. Причём, параметры, найденные из одного коэффициента переноса можно использовать для вычисления других. Справедливость последнего утверждения можно проверить путём анализа соотношений между коэффициентами переноса. Обычно вводятся такие соотношения:

$$\varphi = Dp/\eta; \quad \psi = \lambda/(\eta c_v). \quad (4.78)$$

В элементарной теории в приближении $l^T/l^D = 1$ эти соотношения запишутся так:

$$\varphi = (1 - \theta^2)/(1 - \theta); \quad \psi = \varphi \gamma. \quad (4.79)$$

Для чистого газа $\varphi = 1,406$, а значение ψ зависит от числа степеней свободы i , так как $\gamma = (i + 2)/i$.

Формулы настоящего параграфа для коэффициента вязкости (4.70), для коэффициента теплопроводности (4.77) и для коэффициента самодиффузии $[D_{11}]_1 = \lim_{x_1 \rightarrow 1} [D_1]_1$ дают:

$$\varphi - 1 + 3\Omega^{22}/10\Omega^{11} = 1 + 6\Omega^{22*}/10\Omega^{11*} \quad (4.80)$$

$$\psi = \varphi [v(0)/\tau(0) + \gamma - 1]. \quad (4.81)$$

Видно, что для твёрдых сфер $\varphi = 1,6$, а значение ψ зависит от числа степеней свободы, и в приближении $v(0)/\tau(0) = 1$, ψ будет совпадать с (4.79). Зависимость ψ от числа степеней свободы в теории Чепмена-Энскога [3, 4, 12] вводилась через поправку Эйкена, что позволяло согласовать теорию с экспериментом. Полученные нами соотношения (4.78), (4.81) отражают зависимость от i без введения поправок, хотя они несколько хуже согласуются с экспериментом, чем результаты поправки Эйкена.

Литература

1. Айтқожаев А.З. Сиретілген газдардағы тасымалдау процестерінің кинетикалық теориясы. Оқу құралы. – Алматы.- 2005. ИБ № 32816 48 б.
2. Гирифельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей. – М.: ИЛ, 1961. – 930 с.
3. Ферцигер Дж., Капер Г. Математическая теория процессов переноса в газах. - М.: Мир, 1976.- 556с.
4. Курлапов Л.И. Кинетическая теория необратимых процессов в газах. Монография. – Алматы. –2000. 249 с. ISBN 9965-408-62-9.
5. Матвеев А.Н. Молекулярная физика: Учебник для физич. спец. вузов.- 2-е изд., перераб. и доп.- М.: Высш. шк., 1987.- 360 с.: ил.
6. Кикоин А.К., Кикоин И.К. Общий курс физики. Молекулярная физика.- М.: Наука, 1976.- 480 с.: ил.
7. Савельев И.В. Курс физики: Учебник в трех томах. Том 1: Молекулярная физика. Механика.- М.: Наука, гл. ред. физ.-мат. лит., 1989.- 352 с. : ил.
8. Молекулярная физика. Общий физический практикум. Учебное пособие для студентов высших учебных заведений./ Исатаев С.И. и др. Алматы: Казак университеті, 2003.- 140 с.
9. Больцман Л. Лекции по теории газов. -М.:ГИТТЛ,1956. -555с.
10. Курлапов Л.И. Описание диффузии газов умеренной плотности на основе уравнения Больцмана-Лоренца-Энскога // ЖТФ.-1986.-Т.56.-№2.-с.386.
11. Чепмен С., Каулинг Т. Математическая теория неоднородных газов. М.: ИЛ. 1960. - 510 с.

