

ОБ УРАВНЕНИЯХ ГАЗОДИНАМИКИ ПРИ НАЛИЧИИ  
КОЛЕБАТЕЛЬНОЙ РЕЛАКСАЦИИ

Л. А. Пальцев

(Москва)

Выводятся уравнения газодинамики в приближении Навье — Стокса при слабом возбуждении колебательных состояний молекул. Определена зависимость функции распределения от плотности чисел заполнения колебательных состояний молекул. Показано, что релаксационное давление пропорционально отклонению плотности колебательной энергии от ее локально-равновесного значения при температуре поступательных и вращательных степеней свободы молекул.

Структура уравнений газодинамики при наличии колебательной релаксации рассматривалась в работах [1-6]. В зависимости от степени возбуждения колебательных состояний молекул существенным образом изменяются не только кинетические коэффициенты, но и структура уравнений переноса. Наиболее подробно исследовано так называемое «двухтемпературное приближение». В общем случае [3, 6] такое приближение не достаточно, и известную систему уравнений газодинамики необходимо дополнить уравнением для  $n_v$  числа молекул в единице объема, находящихся на колебательном уровне  $v$ .

Известно [3], что для простейшей модели колебательных переходов, гармонический осциллятор с одноквантовыми переходами, уравнения газодинамики в приближении Эйлера достаточно дополнить только релаксационным уравнением для плотности колебательной энергии и не учитывать уравнения для  $n_v$ . Однако было неясно, является ли это справедливым для уравнений газодинамики в приближении Навье — Стокса. Для исследования этого вопроса уже не достаточно общих соображений о структуре интеграла столкновений, а необходимо рассмотреть конкретную модель взаимодействия между молекулами и получить явное выражение для интеграла столкновений.

В данной работе рассматривается двухатомный газ при слабом возбуждении колебательных состояний молекул, когда  $\xi$  — отклонение межатомного расстояния в молекуле от его равновесного значения мало. В этом случае, следуя [7], потенциал взаимодействия между молекулами и, следовательно, вероятности переходов при столкновении можно представить в виде ряда по  $\xi$ . Ограничиваясь в интеграле столкновений вкладом членов порядка  $\xi^2$ , получаем кинетическое уравнение, учитывающее одноквантовые колебательные переходы. Оказывается, что даже для такой простой модели межмолекулярного взаимодействия необходимо в приближении Навье — Стокса учитывать уравнение для  $n_v$ .

1. Неравновесное состояние однокомпонентного многоатомного газа при отсутствии внешних полей можно определить [8], зная одночастичную функцию распределения (функцию Вигнера)  $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}; l, t)$ , где  $\mathbf{r}$  и  $\mathbf{p}$  — координата и импульс центра масс молекулы,  $l$  — полный набор квантовых чисел, определяющих ее внутреннюю энергию  $E_l$ . Эволюция этой функции

во времени  $t$  определяется кинетическим уравнением

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{m} \mathbf{p}_1 \text{grad}_{\mathbf{r}} \right) f(1) = I(f, f) \quad (1.1)$$

где  $f(1) = f(\mathbf{r}, \mathbf{p}_1; l_1, t)$

$$I(f, f) = \int d1_0' d2_0' d2_0 w(12; 1'2') \delta(\Sigma \mathbf{p}) [f^*(1') f^*(2') - f^*(1) f^*(2)] \quad (1.2)$$

$I(f, f)$  — интеграл столкновений.

Здесь  $w(12; 1'2')$  — вероятность перехода в единицу времени из состояния  $(\mathbf{p}_1', \mathbf{p}_2', l_1', l_2')$  в состояние  $(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, l_1, l_2)$ , которая определяется через матричные элементы  $T$ -оператора в пространстве собственных состояний невзаимодействующих молекул 1 и 2 в системе их центра инерции известным соотношением [9]

$$w(12; 1'2') = \frac{(2\pi)^2}{h} \sum_{M_1 M_2 M_1' M_2'} \left| \left\langle \begin{matrix} l_1 M_1; l_2 M_2 \\ \mathbf{p}_{21} \end{matrix} \middle| T \middle| \begin{matrix} l_1' M_1'; l_2' M_2' \\ \mathbf{p}_{21}' \end{matrix} \right\rangle \right|^2 \delta \left( \frac{1}{2m} [p_1^2 + p_2^2 - p_1'^2 - p_2'^2] + E_{l_1} + E_{l_2} - E_{l_1'} - E_{l_2'} \right)$$

где  $f^*(j) = g^{-1}(j) f(j)$ ,  $M_j$  — квантовые числа по которым состояние, соответствующее  $E_{l_j}$ , вырождено,  $g(j)$  — кратность вырождения этого состояния

$$\int d1_0 = \sum_{l_1} \int d\mathbf{p}_1, \quad \delta(\Sigma \mathbf{p}) = h^3 \delta(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1' - \mathbf{p}_2')$$

Рассмотрим случай, когда потенциал взаимодействия между двухатомными молекулами можно представить в виде

$$\Phi(12) = \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^2 \Phi_{ij}(|\mathbf{r}_{1i} - \mathbf{r}_{2j}|) \quad (1.3)$$

где  $\mathbf{r}_{ji}$  — координата  $i$ -го атома в  $j$ -й молекуле. Обозначим через  $\mathbf{r}_j$ ,  $\xi_j$  и  $\mathbf{u}_j$  координату центра масс, отклонение межатомного расстояния от равновесного  $R_0$  и единичный вектор в направлении от второго атома к первому в  $j$ -й молекуле. Будем считать, что  $\xi_j / R_0 \ll 1$ . Тогда, следуя [7],  $\Phi(12)$  можно представить в виде ряда по  $\xi_j$ . С точностью до первого порядка по  $\xi_j$  из (1.3) имеем

$$\Phi(12) = \Phi^{(0)}(12) + \sum_{j=1}^2 \xi_j V(j) \quad (1.4)$$

Здесь  $\Phi^{(0)}(12)$  — потенциал взаимодействия (жестких) ротаторов, который получается из (1.3) при замене  $\mathbf{r}_{ji}$  на

$$\mathbf{R}_{ji} = \mathbf{r}_j + (-1)^i \frac{R_0 \mu}{m_i} \mathbf{u}_j, \quad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

$m_i$  — масса  $i$ -го атома

$$V(j) = \sum_{k=1}^2 \sum_{i=1}^2 (-1)^i \frac{\mu \mathbf{u}_j}{m_i} \frac{\partial \Phi^{(0)}(|\mathbf{R}_{ji} - \mathbf{R}_{3-j,k}|)}{\partial (|\mathbf{R}_{ji} - \mathbf{R}_{3-j,k}|)}$$

В операторе внутренней энергии молекулы учтем члены порядка  $\xi^2$ , т. е. будем пренебрегать ангармоничностью колебаний и связью колебаний с вращениями. Тогда внутреннее состояние молекулы определяется [10] квантовыми числами  $J, M, v$ , где  $J$  и  $M$  — квантовые числа полного внутреннего момента и его проекции на ось  $z$  и  $v$  — колебательное квантовое число. При этом

$$E_{Jv} = E_J + E_v, \quad E_J = \hbar^2 (2\mu R_0^2)^{-1} J(J+1), \quad E_v = h\nu(v + 1/2)$$

$$\langle v | \xi | v' \rangle = \delta_{v', v+1} \sqrt{\frac{\hbar}{4\pi\mu\nu}} (v+1)$$

$\nu$  — собственная частота вибратора и  $\delta_{\alpha, \alpha'}$  — символ Кронекера.

Учитывая определение  $T$ -оператора [9] и выражение для потенциала взаимодействия между молекулами (1.4), интеграл столкновений с учетом членов второго порядка по  $\xi$  можно представить в виде

$$I(f, f) = I^{(0)}(f, f) + I^{(1)}(f, f) + I^{(2)}(f, f) \quad (1.5)$$

Здесь интеграл столкновений

$$I^{(0)}(f, f) = \sum_{v_2} \int d1' d2' d2 W^{(0)}(12; 1'2') [f_{v_1}^*(1') f_{v_2}^*(2') - f_{v_1}^*(1) f_{v_2}^*(2)] \quad (1.6)$$

учитывает только вклад столкновений, при которых не изменяются колебательные состояния молекул

$$\int d1 = \sum_{J_1} dp_1, f_{v_1}(1) = f(\mathbf{r}, \mathbf{p}_1; J_1 v_1)$$

$$W^{(0)}(12; 1'2') = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{M_1 M_2 M_1' M_2'} \left| \left\langle \begin{smallmatrix} \alpha_1, \alpha_2 \\ p_{21} \end{smallmatrix} \right| T_r \left| \begin{smallmatrix} \alpha_1', \alpha_2' \\ p_{21}' \end{smallmatrix} \right\rangle \right|^2 \times \delta(\Sigma p) \delta(E_J - E_J)$$

$T_r$  есть  $T$ -оператор для] модели ротаторов,  $\alpha_j = (J_j M_j)$  и

$$E_J = \sum_{j=1}^2 \left( \frac{1}{2m} p_j^2 + E_{J_j} \right)$$

Интеграл столкновений

$$\begin{aligned} I^{(1)}(f, f) = & \sum_{i=1}^2 \sum_{i' \neq j}^2 \sum_{v_2} \int d1' d2' d2 W_j^{(1)}(12; 1'2') \times \\ & \times \{ [(v_j + 1) \delta(+)] f_{v_j+1}^*(j') + v_j \delta(-) f_{v_j-1}^*(j') \} f_{v_i}^*(i') - \\ & - [(v_j + 1) \delta(+)] f_{v_j}^*(j) f_{v_i}^*(i) \} \end{aligned} \quad (1.7)$$

учитывает вклад столкновений с одноквантовыми колебательными переходами, где

$$W_j^{(1)}(12; 1'2') = \frac{1}{2i\hbar\nu} \sum_{M_1 M_2 M_1' M_2'} \left| \left\langle \begin{smallmatrix} \alpha_1, \alpha_2 \\ p_{21} \end{smallmatrix} \right| \Omega^{(-)} V(j) \Omega^{(+)} \left| \begin{smallmatrix} \alpha_1', \alpha_2' \\ p_{21}' \end{smallmatrix} \right\rangle \right|^2 \delta(\Sigma p)$$

$\Omega^{(\pm)}$  — операторы Меллера [9] для модели ротаторов и  $\delta(\pm) = \delta(E_J - E_J \pm h\nu)$ .

Интеграл столкновений  $I^{(2)}(f, f)$  получается из  $I^{(0)}(f, f)$  при замене  $W^{(0)}(12; 1' 2')$  на

$$W^{(2)}(12; 1' 2') = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{1}{\mu v} \sum_{j=1}^2 \sum_{M_1 M_2 M_1' M_2'} \operatorname{Re} \left\{ \left\langle \begin{smallmatrix} \alpha_1, \alpha_2 \\ \mathbf{p}_{21} \end{smallmatrix} \right| T_r \left| \begin{smallmatrix} \alpha_1', \alpha_2' \\ \mathbf{p}_{21}' \end{smallmatrix} \right\rangle \times \right. \\ \times \left\langle \begin{smallmatrix} \alpha_1', \alpha_2' \\ \mathbf{p}_{21}' \end{smallmatrix} \right| \Omega^{(+)} V(j) \left[ \frac{v_j + 1}{E_{J'} - H - \hbar v + i\eta} + \frac{v_j}{E_{J'} - H + \hbar v - i\eta} \right] V(j) \Omega^{(-)} \left| \begin{smallmatrix} \alpha_1, \alpha_2 \\ \mathbf{p}_{21} \end{smallmatrix} \right\rangle \times \\ \left. \times \delta(\Sigma \mathbf{p}) \delta(E_{J'} - E_J) \right\}$$

где  $H$  — полный гамильтониан двух ротаторов в системе их центра масс. Из инвариантности  $H$  и  $V(\mathbf{r})$  относительно пространственных отражений и обращения времени [9] следует:

$$W^{(k)}(12; 1' 2') = W^{(k)}(1' 2'; 12), \quad k = 0, 2 \quad (1.8) \\ W_j^{(1)}(12; 1' 2') = W_j^{(1)}(1' 2'; 12)$$

2. Уравнения газодинамики будем выводить, используя кинетическое уравнение (1.1) с интегралом столкновений в виде (1.5). Рассмотрим случай, когда «длина колебательной релаксации» порядка характерного размера пространственной неоднородности в газе [1, 3, 11], т. е. когда отношение  $I^{(1)}$  и  $I^{(2)}$  к  $I^{(0)}$  порядка числа Кнудсена, которое считается малым.

Из выражения для  $I^{(0)}$  (1.6) следует:

$$\sum_{v_1} \int d\mathbf{1} \psi_i I^{(0)}(f, f) = 0$$

при

$$\psi_1 = \delta_{v,v}, \quad \psi_2 = \mathbf{p}_1, \quad \psi_3 = \frac{1}{2m} p_1^2 + E_{J_1} \quad (2.1)$$

Следовательно, медленно изменяющимися на временах порядка времени свободного пробега, определенного для поступательных и вращательных состояний молекул, являются:  $n_v(\mathbf{r}, t)$  — число молекул в единице объема, находящихся в колебательном состоянии  $v$ ,  $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$  — средняя скорость молекул и  $e(\mathbf{r}, t)$  — плотность внутренней энергии (поступательной и вращательной) в расчете на одну молекулу. Введем обозначения

$$N_1 = n_v, \quad N_2 = m n \mathbf{u}, \quad N_3 = n(e + \frac{1}{2} m \mathbf{u}^2) \quad \left( n = \sum_v n_v \right)$$

Тогда локальные газодинамические переменные определяются через функцию распределения следующим образом:

$$N_i = \sum_{v_1} \int d\mathbf{1} \psi_i f_{v_1}(\mathbf{1}) \quad (i = 1, 2, 3) \quad (2.2)$$

Учитывая определение (2.2), из (1.1) с интегралом столкновений в виде (1.5) имеем систему уравнений газодинамики

$$\frac{D n_v}{Dt} = -n_v \operatorname{div} \mathbf{u} - \operatorname{div} \mathbf{j}_v + Q_v \\ n m \frac{D \mathbf{u}}{Dt} = -\operatorname{Div} \mathbf{P} \quad (2.3) \\ n \frac{D e}{Dt} = -\operatorname{div} \mathbf{q} - P \operatorname{Grad} \mathbf{u} - Q_e \quad \left( \frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + (\mathbf{u} \operatorname{grad}) \right)$$

Здесь тензор напряжений  $P$  и поток энергии  $q$  определяются обычным образом [8]

$$P^{ij} = \frac{1}{m} \sum_{v_1} d1 p_1^{*i} p_1^{*j} f_{v_1}(1) \quad (2.4)$$

$$q^j = \frac{1}{m} \sum_{v_1} d1 p_1^{*j} \left( \frac{1}{2m} (p_1^*)^2 + E_{J_1} \right) f_{v_1}(1) \quad (i, j = 1, 2, 3, \quad p^{*j} = p^j - m u^j)$$

а поток  $j_v$  и источник  $Q_v$  в уравнении переноса плотности колебательных состояний, а также источник  $Q_e$  в уравнении энергии есть

$$j_v^i = \frac{1}{m} \sum_{v_1} d1 p_1^{*i} f_v(1) \quad (2.5)$$

$$Q_v = \int d1 I^{(1)}(f, f), \quad Q_e = \sum_v h\nu n_v Q_v$$

Заметим, что плотность колебательной энергии на молекулу для рассматриваемой модели определяется следующим образом:

$$e_k(r, t) = n^{-1}(r, t) \sum_v h\nu n_v(r, t)$$

Для вывода уравнений газодинамики используем метод Чепмена — Энскога. В качестве дополнительных условий на коэффициенты разложения  $f_v$  в ряд по числу Кнудсена потребуем, чтобы локальные газодинамические переменные определялись членом нулевого порядка. Кроме того, вместо  $e$  будем использовать обратную локальную температуру, которую определим обычным образом [8]

$$e = 3/2\beta + e_i(\beta)$$

где

$$e_i(\beta) = Q^{-1} \sum_{J_1} g(1) E_{J_1} \exp(-\beta E_{J_1}), \quad Q = \sum_{J_1} g(1) \exp(-\beta E_{J_1})$$

3. Рассмотрим нулевое приближение по числу Кнудсена. Функция распределения в этом приближении удовлетворяет нелинейной системе интегральных уравнений

$$I^{(0)}(f^{(0)}, f^{(0)}) = 0$$

Используя функцию

$$H = \sum_v \int d1 f_v(1) \ln \left[ \frac{f_v(1)}{g(1)} \right]$$

соотношения (1.8) и определение локальных газодинамических переменных, можно аналогично [2] показать, что

$$f_v^{(0)}(1) = n_v F(1) \equiv n_v \frac{g(1)}{Q} \left( \frac{\beta}{2\pi m} \right)^{3/2} \exp \left[ -\beta \left( \frac{p_1^{*2}}{2m} + E_{J_1} \right) \right] \quad (3.1)$$

Тогда, учитывая определение потоков и источников (2.4) и (2.5), в нулевом приближении получим

$$\mathbf{j}_v^{(0)} = 0, \quad \mathbf{q}^{(0)} = 0; \quad P^{(0)}_{ij} = n\beta^{-1} \delta_{ij} \quad (3.2)$$

$$Q_v^{(0)} = \frac{1}{\tau} [(v+1)n_{v+1} + \gamma v n_{v-1} - \{\gamma(v+1) + v\} n_v] \quad (3.3)$$

$$Q_e^{(0)} = n\tau_k^{-1} (e_k - e_0)$$

Здесь  $\gamma = \exp(-\beta h\nu)$ ,  $e_0 = h\nu\gamma(1-\gamma)^{-1}$

$$\tau^{-1} = \frac{n}{2} \int d1' d2' d1 d2 \delta(+)^* F^*(1) F^*(2) \sum_{j=1}^2 W_j^{(1)}(12; 1'2'), \quad F^*(j) = g^{-1}(j) F(j)$$

$$\tau_k = \tau(1-\gamma)^{-1} \quad (3.4)$$

Следовательно, система уравнений газодинамики в приближении Эйлера имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{Dn}{Dt} &= -n \operatorname{div} \mathbf{u}, \quad nm \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\operatorname{grad}(n\beta^{-1}) \\ \frac{D\beta}{Dt} &= -\beta^2 \frac{e_k - e_0}{e_v \tau_k} + \beta c_V^{-1} \operatorname{div} \mathbf{u} \\ \frac{De_k}{Dt} &= -\tau_k^{-1} (e_k - e_0), \quad \frac{Dn_v}{Dt} = -n_v \operatorname{div} \mathbf{u} \end{aligned} \quad (3.5)$$

где время колебательной релаксации  $\tau_k$  определяется соотношением (3.4) и

$$c_V = \frac{3}{2} - \beta^2 \frac{de_i}{d\beta}$$

4. Перейдем к определению поправки первого порядка по числу Кнудсена к функции распределения. Эта функция, которую будем обозначать как  $f_v^1$ , определяется из неоднородной системы линейных интегральных уравнений с симметричными ядрами (см. соотношения (1.8))

$$\begin{aligned} \left[ \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{m} (\mathbf{p}_1 \operatorname{grad}_r) \right] f_v^{(0)}(1) - I^{(1)}(f^{(0)}, f^{(0)}) - I^{(2)}(f^{(0)}, f^{(0)}) = \\ = I^{(0)}(f^{(1)}, f^{(0)}) + I^{(0)}(f^{(0)}, f^{(1)}) \end{aligned} \quad (4.1)$$

при дополнительных условиях

$$\sum_{v_1} \int d1 \psi_i f_{v_1}^{(1)}(1) = 0 \quad (4.2)$$

где  $\psi_i$  определяются соотношениями (2.4).

Учитывая выражение для  $I^{(1)}$  и  $I^{(2)}$ , имеем

$$\begin{aligned} I^{(2)}(f^{(0)}, f^{(0)}) &= 0 \\ I^{(1)}(f^{(0)}, f^{(0)}) &= \sum_{v'} n_{v'} B_{v_1 v'} [\Delta_1^{(\pm)}] + n_{v_1} (1-\gamma) \frac{e_k - e_0}{h\nu} \sum_{j=1}^2 (\Delta_j^{(+)} - \Delta_j^{(-)}) \end{aligned} \quad (4.3)$$

где

$$B_{vv'} [\Delta^{(\pm)}] = v' \delta_{v', v+1} \Delta^{(+)} + \gamma (v' + 1) \delta_{v', v-1} \Delta^{(-)} - \delta_{vv'} \left( \gamma (v' + 1) \Delta^{(+)} + v' \Delta^{(-)} + (1 - \gamma) \frac{e_k - e_0}{\hbar v} [\Delta^{(+)} - \Delta^{(-)}] \right) \quad (4.4)$$

$$\Delta_j^{(\pm)} = n \int d1' d2' d2 W_j^{(1)}(12; 1'2') \begin{cases} \delta(+), F^*(1') F^*(2') \\ \delta(-), F^*(1) F^*(2) \end{cases} \quad (4.5)$$

Заметим, что из (4.4) следует:

$$\sum_{vv'} n_v B_{vv'} = 0$$

Распишем обычным образом [3] левую часть системы уравнений (4.1), используя выражение (3.1) для  $f_v^{(0)}$  и уравнения Эйлера (3.6). Тогда, учитывая дополнительные условия (4.2), можно показать, что

$$f_{v_1}^{(1)}(1) = n_{v_1} F(1) \Phi_{v_1}(1) \quad (4.6)$$

где

$$\Phi_{v_1}(1) = \Phi^{(1)}(1) - \frac{1}{n^2} \sum_{v'} C_{vv'}(1) \cdot p_1^* \text{grad } n_{v_1} + \frac{1}{n} G_{v_1}(1) \quad (4.7)$$

Здесь  $\Phi^{(1)}(1)$  — известная функция первого приближения [3], определяемая для модели ротаторов, а функции  $C_{vv'}(1)$  и  $G_v(1)$  удовлетворяют системам уравнений

$$\frac{p_1^*}{m} F(1) (\delta_{v_1 v'} - c_{v_1}) = \sum_{v_2} c_{v_1} c_{v_2} I_{v_1 v_2} (1/p^* C_{vv'}) \quad (4.8)$$

$$-c_{v_1} A(1) \varepsilon_k + \sum_{v'} c_{v'} B_{v_1 v'} [\lambda_1^{(\pm)}] = \sum_{v_2} c_{v_1} c_{v_2} I_{v_1 v_2} (1/G_v) \quad (4.9)$$

и дополнительным условиям

$$\sum_{v_1} \int d1 n_{v_1} C_{vv'}(1) p_1^{*2} F(1) = \sum_{v_1} \int d1 \psi_i n_{v_1} G_{v_1}(1) F(1) = 0 \quad (4.10)$$

Здесь  $c_v = n_v / n$ ,  $\varepsilon_k = \beta^2 (e_k - e_0) (c_v \tau_k)^{-1}$

$$A(1) = \left( \frac{1}{2m} p_1^{*2} - \frac{3}{2\beta} + E_J - \varepsilon_i \right) - \frac{c_v \tau_k}{\beta^2 \hbar v (1 - \gamma)} \sum_{j=1}^2 (\lambda_j^{(+)} - \lambda_j^{(-)}) \quad (4.11)$$

$$\lambda_j^{(\pm)} = \Delta_j^{(\pm)} - \tau^{-1} F(j) \quad (4.12)$$

$$I_{v_1 v_2} (1 / H_{vv'}) = \int d1' d2' d2 W^{(0)}(12; 1'2') F^*(1) F^*(2) \times \\ \times \{H_{v_1 v'}(1) + H_{v_2 v'}(2) - H_{v_1 v'}(1') - H_{v_2 v'}(2')\} \quad (4.13)$$

Решение системы уравнений (4.8) можно искать в виде

$$C_{vv'}(1) = c_v^{-1} (\delta_{vv'} - c_v) C(1) \quad (4.14)$$

где функции  $C(1)$  определяются из уравнений

$$\frac{p_1^*}{m} F(1) = I^{(1)}(1 / p^* C) \equiv \int d1' d2' d2 W^{(0)}(12; 1'2') F^*(1) F^*(2) (p_1^* C(1) - p_1^* C'(1)) \quad (4.15)$$

Дополнительные условия (4.10), как следует из (4.13), выполняются тождественно.

Рассмотрим решение системы уравнений (4.9). Введем функции

$$G(1) = \sum_v c_v G_v(1), \quad \varphi_v(1) = G_v(1) - G(1)$$

для которых из (4.10) имеем уравнения

$$-A(1) \varepsilon_k = I(1/G), \quad \sum_{v'} c_{v'} B_{vv'} [\lambda_1^{(\pm)}] = c_v I^{(1)}(1/\varphi_v) \quad (4.16)$$

и дополнительные условия

$$\int d\lambda \psi_i^\circ G(1) F(1) = \int d\lambda \varphi_v(1) F(1) = 0 \quad (4.17)$$

где  $\psi_i^\circ$  есть  $\psi_i$  (см. (2.1)) при  $\psi_1 = 1$  (а не  $\delta_{vv'}$ ), интегралы  $I(1/G)$  и  $I^{(1)}(1/\varphi_v)$  получаются из (4.13) и (4.15) при замене  $H_{vv'}(i)$  на  $G(i)$  и  $p_1^* C(1)$  на  $\varphi_v(1)$  соответственно. При записи уравнений (4.16) учли, что согласно определению

$$\sum_v c_v \varphi_v = 0$$

Из (4.16) следует, что  $G$  и  $\varphi_v$  можно искать в виде

$$G(1) = -R(1) \varepsilon_k, \quad \varphi_v(1) = c_v^{-1} \sum_{v'} c_{v'} B_{vv'} [\omega_1^{(\pm)}]$$

Функции  $R$  и  $\omega_1^{(\pm)}$  определяются из уравнений

$$A(1) = I(1/R), \quad \lambda_1^{(\pm)} = I^{(1)}(1/\omega_1^{(\pm)}) \quad (4.18)$$

при дополнительных условиях (4.17), где вместо  $G$  и  $\varphi_v$  необходимо подставить  $R$  и  $\omega_1^{(\pm)}$  соответственно. Функции  $A(1)$  и  $\lambda_1^{(\pm)}$  определяются соотношениями (4.11) и (4.12).

Таким образом, для функции первого приближения по числу Кнудсена имеем следующее выражение:

$$f_v^{(1)}(1) = n_v F(1) \Phi^{(1)}(1) - F(1) C(1) p_1^* \text{grad } n_v / n - n_v F(1) R(1) \beta^2 \frac{e_h - e_v}{c_v n \tau_k} + \\ + \frac{1}{n} F(1) \sum_{v'} n_{v'} B_{vv'} [\omega_1^{(\pm)}] \quad (4.19)$$

5. Используя выражение для  $f_v^{(1)}(1)$  (4.19), можно определить поправки первого порядка по числу Кнудсена к потокам и источникам газодинамических переменных и записать уравнения газодинамики в приближении Навье — Стокса.

Согласно определению (2.5), учитывая (4.19), имеем

$$j_v^{(1)} = -nD \text{grad } n_v / n \quad (5.1)$$

где «коэффициент самодиффузии»

$$D = \frac{1}{3m\eta} \int d\lambda p_1^* C(1) F(1)$$

Член, пропорциональный градиенту  $\beta$ , от которого зависит функция  $\Phi^{(1)}$  [8], не дает вклада в (5.1) ввиду дополнительных условий для этой функции. Если считать, что при столкновении вращательные состояния не возбуждаются и происходит только переход между поступательными и колебательными состояниями, то из (5.1) следует выражение для  $\mathbf{j}_v$ , полученное в работе [12].

Поток энергии можно записать в виде

$$\mathbf{q}^{(1)} = -\lambda \operatorname{grad} T$$

где  $T$  — температура,  $\lambda$  — известный [8] коэффициент теплопроводности для модели ротаторов. Как следует из (4.14), член, пропорциональный градиенту  $n_v$ , не дает вклада в поток энергии.

Для тензора напряжений  $P^{(1)}$  имеем следующее выражение:

$$P^{(1)}_{ij} = -\eta \left( \frac{\partial u^i}{\partial r^j} + \frac{\partial u^j}{\partial r^i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \operatorname{div} \mathbf{u} \right) - \delta_{ij} (\eta_v \operatorname{div} \mathbf{u} - P_r)$$

где  $\eta_e$  и  $\eta_v$  — известные [8] коэффициенты сдвиговой и объемной вязкостей для модели ротаторов, а  $P_r$  — так называемое релаксационное давление, которое определяется следующим образом:

$$P_r = \frac{e_k - e_0}{c_v \tau_k} \beta^2 \frac{1}{3m} \int d\mathbf{p}_1 {}^* R(1) F(1)$$

т. е. релаксационное давление пропорционально отклонению плотности колебательной энергии от ее локально-равновесного значения при температуре поступательных и вращательных степеней свободы молекул. Аналогичная по форме зависимость релаксационного давления от плотности колебательной энергии в «двухтемпературном приближении» была получена в работе [13] для модели гармонического осциллятора, когда переходы между поступательными и колебательными степенями свободы не сопровождаются изменением вращательных состояний молекул.

Подставляя полученные в нулевом и первом приближениях по числу Кнудсена выражения для потоков и источников газодинамических переменных в систему уравнений (2.2), получим уравнения газодинамики в приближении Навье-Стокса. Учитывая выражение для  $Q_e^{(1)}$ , легко видеть, что в этом приближении уравнения газодинамики уже нельзя, как в приближении Эйлера, представить в виде замкнутой системы уравнений для  $n$ ,  $\mathbf{u}$ ,  $\beta$  и  $e_k$  и необходимо рассматривать уравнения для  $n_v$ .

Определение релаксационного давления, времени колебательной релаксации, а также источников  $Q_v$  и  $Q_e$  связано с решением выписанных выше линейных интегральных уравнений. Однако для решения этих уравнений необходимо знать операторы Меллера для жестких ротаторов, а не только вероятности соответствующих переходов. В настоящее время решение этой квантовомеханической задачи связано со значительными вычислительными трудностями, и поэтому количественные оценки в данной работе не рассматриваются.

В заключение автор благодарит В. Н. Жигулеву и В. С. Галкина за обсуждение полученных результатов.

Поступила 20 XII 1971

## ЛИТЕРАТУРА

1. Жигулев В. Н. Об уравнениях физической аэродинамики. Инж. ж., 1963, т. 3, вып. 1.
2. Жигулев В. Н. Об уравнениях движения неравновесной среды с учетом излучения. Инж. ж., 1964, т. 4, вып. 2, 3.
3. Коган М. Н. Об уравнениях неравновесных течений газа. ПМТФ, 1965, № 1.
4. Ступоченко Е. В., Лосев С. А., Осипов А. И. Релаксационные процессы в ударных волнах. М., Физматгиз, 1965.
5. Валандер С. В., Егорова И. А., Рыдалевская М. И. Распространение метода Чепмена — Энскога на смеси газов с внутренними степенями свободы и химическими реакциями. В сб. «Аэродинамика разреженных газов», т. 2, Л., Изд-во ЛГУ, 1965, стр. 122—162.
6. Покровский Л. А. Вывод уравнений релаксационной нелинейной гидродинамики методом неравновесного статистического оператора I. Теорет. и матем. физика, 1970, т. 2, № 1.
7. Berne B. J., Jortner J., Gordon R. Vibrational relaxation of Diatomic Molecules in Gases and Liquids. J. Chem. Phys., 1967, vol. 47, No. 5.
8. Waldman L. Transporterscheinungen in Gasen von Mittlerem Druck. Handbuch der Physik, Bd 12, Berlin, Göttingen Heidelberg, Springer Verlag, 1958, S. 295—514. (Рус. перев.: Явления переноса в газах при среднем давлении. В сб. «Термодинамика газов», М., «Машиностроение», 1970.)
9. Гольдбергер М., Ватсон К. Теория столкновений. М., «Мир», 1967.
10. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика, т. 3. Квантовая механика. М., «Физматгиз», 1963.
11. Ludwig G., Heil M. Boundary — Layer theory with dissociation and ionisation. Adv. Appl. Mech., vol. 6, New York — London, Acad. Press, 1960, pp. 39—118. (Рус. перев.: Теория пограничного слоя с диссоциацией и ионизацией. В сб. «Проблемы механики», вып. 4, М., Изд-во иностр. лит., 1963, стр. 33—99.)
12. Галкин В. С., Коган М. Н. Об уравнениях неравновесных течений многоатомных газов в приближении Эйнена. В сб. «Проблемы гидродинамики и механики сплошной среды», М., «Наука», 1969, стр. 119—128.
13. Кузнецов В. М. К теории объемной вязкости. Изв. АН СССР, МЖГ, 1967, № 6.