УДК 533.72

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТА ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ И ВЯЗКОСТИ ГАЗА НА ОСНОВЕ МОДЕЛИ АБСОЛЮТНО ГИБКИХ ВРАЩАЮЩИХСЯ ШАРОВ

М. П. КОРОТКОВ

(Москва)

Проведены вычисления коэффициентов теплопроводности, а также первой и второй вязкости для новой модели абсолютно гибких шаров, введенной в [1]. Эта модель наряду с моделью шероховатых шаров является самой простой среди моделей, учитывающих вращение молекул, что позволяет сравнительно легко получить выражения для феноменологических коэффициентов. Простота моделей не является препятствием для применения их к реальным газам. Так, отношение теплоемкостей γ для этих моделей равно $^4/_3$. Примерами газов, у которых такое отношение наиболее близко к $^4/_3$, являются хлор ($\gamma=1.355$), метан и аммиак ($\gamma=1.310$) [3]. Кроме этого, обе эти модели дают возможность получить поправки на вращение к коэффициенту объемной вязкости и теплопроводности. Эти поправки объясняют, почему затухание звуковых волн в аммиаке составляет примерно $^5/_3$ от того, что имело бы место в присутствии только обычной вязкости и теплопроводности [3].

1. Модель абсолютно гибких шаров. Абсолютно гибкие шары представляют собой систему твердых шаров, обладающих поступательной скоростью $\mathbf{c}$ и вращательной скоростью $\boldsymbol{\omega}$. Шары взаимодействуют посредством столкновений, причем ударные силы приводятся не только к главному вектору, но и к главному моменту. Уравнения удара для двух шаров имеют вид

$$\begin{aligned} &m_1\mathbf{c}_1'=m_1\mathbf{c}_1-\mathbf{S}, \quad I_1\boldsymbol{\omega}_1'=I_1\boldsymbol{\omega}_1-{}^1/_2\sigma_1[\mathbf{k}\times\mathbf{S}]-\mathbf{L} \\ &m_2\mathbf{c}_2'=m_2\mathbf{c}_2+\mathbf{S}, \quad I_2\boldsymbol{\omega}_2'=I_2\boldsymbol{\omega}_2-{}^1/_2\sigma_2[\mathbf{k}\times\mathbf{S}]+\mathbf{L} \end{aligned} \tag{1.1}$$

Здесь $\mathbf{S}$ и $\mathbf{L}$ – соответственно ударный импульс и ударный момент; σ_i, m_i, I_i – соответственно диаметр, масса и момент инерции i-го шара; $\mathbf{k}$ – единичный вектор, направленный из центра первой молекулы к центру второй. Пусть суммарная энергия молекул при ударе сохраняется; тогда

$$\begin{aligned} &\varepsilon'-\varepsilon={}^1/_2(\mathbf{V}_{21}+\mathbf{V}_{21}')\mathbf{S}+{}^1/_2(\boldsymbol{\Omega}_{21}+\boldsymbol{\Omega}_{21}')\mathbf{L}=0 \\ &\varepsilon={}^1/_2(m_1c_1^2+m_2c_2^2+I_1\omega_1^2+I_2\omega_2^2) \\ &\mathbf{V}_{21}=\mathbf{c}_2-\mathbf{c}_1+{}^1/_2[\mathbf{k}\times(\boldsymbol{\omega}_1\sigma_1+\boldsymbol{\omega}_2\sigma_2)], \qquad \boldsymbol{\Omega}_{21}=\boldsymbol{\omega}_2-\boldsymbol{\omega}_1 \end{aligned}$$

Здесь $\mathbf{V}_{21}$ и $\boldsymbol{\Omega}_{21}$ – относительная поступательная скорость и относительная угловая скорость в точке касания шаров. Очевидно, что выписанных соотношений не хватает для выражения штрихованных величин через нештрихованные. Самыми простыми соотношениями, замыкающими систему, будут

$$\mathbf{V}_{21}=-\mathbf{V}_{21}', \quad \boldsymbol{\Omega}_{21}=-\boldsymbol{\Omega}_{21}' \tag{1.2}$$

Модель абсолютно шероховатых шаров получится, если вместо (1.2) принять $\mathbf{V}_{21}=-\mathbf{V}_{21}'$, $\boldsymbol{\Omega}_{21}=\boldsymbol{\Omega}_{21}'$.

Соотношения (1.2) для модели абсолютно гибких шаров означают, что относительные поступательная и угловая скорости молекул после столкновения меняются на обратные. Соотношения (1.2) вместе с уравнениями (1.1) дают замкнутую систему для выражения скоростей после удара через скорости до удара. Уравнение энергии выполняется автоматически в силу (1.2). Точно так же, как и для модели абсолютно шероховатых шаров, можно проверить, что якобиан преобразования нештрихованных величин в штрихованные равен единице.

В дальнейшем будем рассматривать однокомпонентный газ; тогда соотношения, выражающие скорости после столкновения через скорости до столкновения, имеют вид

$$\begin{aligned} &\mathbf{c}_1'=\mathbf{c}_1+\frac{\varkappa}{1+\varkappa}[\mathbf{V}_{21}+1/\varkappa\mathbf{k}(\mathbf{k}\mathbf{V}_{21})], \qquad \boldsymbol{\omega}_1'=\boldsymbol{\omega}_1+\boldsymbol{\Omega}_{21}+\frac{2}{\sigma(1+\varkappa)}[\mathbf{k}\times\mathbf{V}_{21}] \\ &\mathbf{c}_2'=\mathbf{c}_2-\frac{\varkappa}{1+\varkappa}[\mathbf{V}_{21}+1/\mathbf{k}(\mathbf{k}\mathbf{V}_{21})], \qquad \boldsymbol{\omega}_2'=\boldsymbol{\omega}_2-\boldsymbol{\Omega}_{21}+\frac{2}{\sigma(1+\varkappa)}[\mathbf{k}\times\mathbf{V}_{21}] \end{aligned} \tag{1.3}$$

Здесь $\varkappa=4I/m\sigma^2$ — параметр, характеризующий обмен между вращательной и поступательной энергией.

2. Кинетическое уравнение. Будем исходить из кинетического уравнения в форме

$$\frac{\partial f_1}{\partial t}+\mathbf{c}_1\frac{\partial f_1}{\partial \mathbf{x}_1}=\left[\frac{\partial f_1}{\partial t}\right], \qquad \left[\frac{\partial f_1}{\partial t}\right]=\sigma^2\iint(f_1'f_2'-f_1f_2)\gamma(\mathbf{k}\mathbf{c}_{21})\,d\mathbf{k}\,d\mathbf{c}_2\,d\boldsymbol{\omega}_2$$

Здесь $\mathbf{c}_{21}=\mathbf{c}_2-\mathbf{c}_1$, $\gamma(x)=x\theta(x)$, $\theta(x)$ — функция Хевисайда. Применяя процедуру Чепмена — Энскога, получим в нулевом приближении

$$f_1{}^0=n\left(\frac{m}{2\pi RT}\right)^{3/2}\left(\frac{I}{2\pi RT}\right)^{3/2}\exp\left[-\frac{m(\mathbf{c}_1-\mathbf{u})^2+I\omega_1{}^2}{2RT}\right]$$

На следующие приближения накладываются условия

$$\int f_1{}^i\xi\,d\mathbf{c}_1\,d\boldsymbol{\omega}_1=0,\qquad i\geqslant1,\qquad \xi=\left\{1,\mathbf{c}_1,\boldsymbol{\omega}_1,\frac{m(\mathbf{c}_1-\mathbf{u})^2+I\omega_1{}^2}{2}\right\}\tag{2.1}$$

тогда

$$n\mathbf{u}=\int f_1\mathbf{c}_1\,d\mathbf{c}_1\,d\boldsymbol{\omega}_1,\qquad n\boldsymbol{\omega}_0=\int f_1\boldsymbol{\omega}_1\,d\mathbf{c}_1\,d\boldsymbol{\omega}_1=0$$

$$n=\int f_1\,d\mathbf{c}_1\,d\boldsymbol{\omega}_1,\qquad 3nRT=\int f_1\frac{m(\mathbf{c}_1-\mathbf{u})^2+I\omega_1{}^2}{2}d\mathbf{c}_1\,d\boldsymbol{\omega}_1$$

Первое приближение ищем в форме $f_1{}^1=f_1{}^0\Phi(\mathbf{c}_1,\boldsymbol{\omega}_1)$. Для функции Φ имеем следующее уравнение:

$$-f_1{}^0\left[\left\{\left(\frac{2RT}{m}\right)^{1/2}(W_1{}^2+\Omega_1{}^2-4)W_1{}^i\right\}\nabla_i\ln T+\right.$$

$$\left.+\{2(W_1{}^iW_1{}^j-{}^1/_3W_1{}^2\delta^{ij})+{}^1/_3\delta^{ij}(W_1{}^2-\Omega_1{}^2)\}\nabla_iu_j\right]=n^2I_1(\Phi)$$

$$n^2I_1(\Phi)=-\sigma^2\iint f_1{}^0f_2{}^0[\Phi_1+\Phi_2-\Phi_1'-\Phi_2']\gamma(\mathbf{k}\mathbf{c}_{21})\,d\mathbf{k}\,d\mathbf{c}_2\,d\boldsymbol{\omega}_2$$

$$\mathbf{W}_1=\left(\frac{m}{2RT}\right)^{1/2}(\mathbf{c}_1-\mathbf{u}),\qquad \boldsymbol{\Omega}_1=\left(\frac{I}{2RT}\right)^{1/2}\boldsymbol{\omega}_1$$

По повторяющимся индексам здесь и далее подразумевается суммирование.

Теория решения такого уравнения подробно изложена в работе [2]. Далее, опуская детали, выпишем лишь те формулы, которые потребуются для вычислений.

Решение Φ представимо в форме

$$\Phi=-n^{-1}\left(\frac{2RT}{m}\right)^{1/2}A^i\nabla_i\ln T-n^{-1}(D\delta^{ij}+B^{ij})\nabla_iu_j$$

где $\mathbf{B}=B^{ij}\mathbf{э}_i\mathbf{э}_j$ — бездивергентный тензор.

В силу линейности уравнения для Φ задачу отыскания функции Φ можно разбить на три независимые задачи: определение вектора $\mathbf{A}$, скаляра D и бездивергентного тензора $\mathbf{B}$. Первая из них соответствует определению коэффициента теплопроводности, вторая — объемной вязкости и третья — сдвиговой вязкости.

3. Теплопроводность. Уравнение для $\mathbf{A}$ имеет вид

$$f_1{}^0(W_1{}^2+\Omega_1{}^2-4)\mathbf{W}_1=nI_1(\mathbf{A})$$

Вектор $\mathbf{A}$ зависит от двух величин — $\mathbf{W}$ и $\boldsymbol{\Omega}$. Тогда общий вид этой зависимости

$$\mathbf{A}=a_1\mathbf{W}+a_2\boldsymbol{\Omega}(\boldsymbol{\Omega}\mathbf{W})+a_3[\boldsymbol{\Omega}\times\mathbf{W}]$$

Далее будем предполагать, что функция Φ четна по $\boldsymbol{\Omega}$; тогда $a_3=0$. Скалярные функции a_1 и a_2 зависят от W^2, Ω^2 и $(\boldsymbol{\Omega}\mathbf{W})^2=W^2\Omega^2\mu^2$.

Условия (2.1) налагают на $\mathbf{A}$ следующее ограничение:

$$\int_0^\infty dW\int_0^\infty d\Omega\int_{-1}^1 d\mu\,W^4\Omega^2(a_1+a_2\Omega^2\mu^2)\exp(-W^2-\Omega^2)=0\tag{3.1}$$

Подставляя выражение для Φ в формулу для потока тепла, можно выразить коэффициент теплопроводности λ через вектор $\mathbf{A}$

$$\lambda=\frac{16R^2T}{3\pi m}\int_0^\infty dW\int_0^\infty d\Omega\int_{-1}^1 d\mu\,\exp(-W^2-\Omega^2)W^4\Omega^2(W^2+\Omega^2)(a_1+a_2\Omega^2\mu^2)$$

Для вычисления функций a_1 и a_2 воспользуемся разложением по ортогональной системе полиномов. В разложении функций a_1 и a_2 по переменной μ ограничимся полиномами нулевой степени. Тогда, выбирая в качестве ортогональной системы полиномы Сонина, получаем

$$a_1=\sum_{ij} a_1^{ij}S^{i}_{3/2}(W^2)S^{j}_{1/2}(\Omega^2),\qquad a_2=\sum_{ij} a_2^{ij}S^{i}_{3/2}(W^2)S^{j}_{3/2}(\Omega^2)$$

Индекс полиномов выбирался из соображений удобства. Представляя a_i полиномами второй степени по W и Ω, можно получить систему линейных алгебраических уравнений для определения коэффициентов разложения. Условие (3.1) дает $2a_1^{00}+$ $+a_2^{00}=0$. Следовательно, будем искать три неизвестных коэффициента a_1^{10}, a_1^{01}, a_2^{00} из системы уравнений

$$\begin{bmatrix} -{}^{15}/_4 \\ -{}^{9}/_4 \\ {}^{3}/_4 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} (\alpha\alpha)_{10}^{10} & (\alpha\alpha)_{01}^{10} & (\alpha\beta)_{00}^{10} \\ (\alpha\alpha)_{10}^{01} & (\alpha\alpha)_{01}^{01} & (\alpha\beta)_{00}^{01} \\ (\beta\alpha)_{10}^{00} & (\beta\alpha)_{01}^{00} & (\beta\beta)_{00}^{00} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a_1^{10} \\ a_1^{01} \\ a_2^{00} \end{bmatrix}$$

$$(3.2)\qquad (\alpha\alpha)_{kn}^{ij}=[\mathbf{W}S^{i}_{3/2}(W^2)S^{j}_{1/2}(\Omega^2)\mathbf{W}S^{k}_{3/2}(W^2)S^{n}_{1/2}(\Omega^2)]=(\alpha\alpha)_{ij}^{kn}$$

$$(\alpha\beta)_{kn}^{ij}=[\mathbf{W}S^{i}_{3/2}(W^2)S^{j}_{1/2}(\Omega^2)\boldsymbol{\Omega}(\boldsymbol{\Omega}\mathbf{W})S^{k}_{3/2}(W^2)S^{n}_{3/2}(\Omega^2)]=(\beta\alpha)_{ij}^{kn}$$

$$(\beta\beta)_{00}^{00}=[\boldsymbol{\Omega}(\boldsymbol{\Omega}\mathbf{W})\boldsymbol{\Omega}(\boldsymbol{\Omega}\mathbf{W})],\qquad [uv]=\iint uI(v)\,d\mathbf{W}\,d\boldsymbol{\Omega}$$

Вычисляя интегралы (3.2) для абсолютно гибких шаров, приходим к следующему выражению для коэффициента теплопроводности:

$$(3.3)\qquad \lambda=\frac{9(R^3T)^{1/2}(\varkappa+1)^2(3117\varkappa^2+1702\varkappa+201)}{16\sigma^2(\pi m)^{1/2}(2771\varkappa^3+2514\varkappa^2+699\varkappa+60)}$$

Аналогичные вычисления для модели абсолютно шероховатых шаров приводят к

$$(3.4)\qquad \lambda=\frac{3(R^3T)^{1/2}(\varkappa+1)^2(2000\varkappa^4+9490\varkappa^3+13449\varkappa^2+7336\varkappa+1121)}{16\sigma^2(\pi m)^{1/2}(1360\varkappa^5+3626\varkappa^4+3673\varkappa^3+2560\varkappa^2+969\varkappa+116)}$$

Здесь и далее результаты по шероховатым шарам взяты из статьи [2].

4. Сдвиговая и объемная вязкость. Уравнения для B_{ij} и D имеют вид $f^0 2(W_iW_j-$ $-{}^1/_3W^2\delta_{ij})=nI(B_{ij})$, $f^0{}^1/_3(W^2-\Omega^2)=nI(D)$. Условия (2.1) налагают на скалярную функцию D два ограничения, а на тензор B_{ij} не налагают никаких ограничений

$$\int\limits_0^\infty dW\int\limits_0^\infty d\Omega\int\limits_{-1}^{1} d\mu W^2\Omega^2 D\begin{Bmatrix} 1 \\ W^2-\Omega^2 \end{Bmatrix}\exp(-W^2-\Omega^2)=\begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \end{Bmatrix}$$

При вычислении B_{ij} и D также ограничимся нулевым приближением по μ и членами второго порядка по $\mathbf{W}$ и $\boldsymbol{\Omega}$. Применяя стандартную процедуру, придем к выражениям для коэффициента вязкости, совпадающим с полученными выражениями для модели абсолютно шероховатых шаров.

Коэффициенты сдвиговой и объемной вязкости η и η_b соответственно будут иметь вид

$$\eta=\frac{5(mRT)^{1/2}(\varkappa+1)^2(10\varkappa+3)}{8\sigma^2\pi^{1/2}(35\varkappa^2+33\varkappa+6)},\qquad \eta_b=\frac{(mRT)^{1/2}(\varkappa+1)^2}{\sigma^2\pi^{1/2}32\varkappa}$$

Автор благодарит Н. А. Слезкина за полезные замечания и внимание к работе.

Поступила 18 VI 1973

ЛИТЕРАТУРА

1. *Слезкин Н. А.* Теория удара вращающихся шаров с абсолютно гибкими поверхностями. Изв. АН СССР. МТТ, 1974, № 5.
2. *Condiff D. W., Wei-Kao Lu, Dahler J. S.* Transport properties of polyatomic fluids, a dilute gas of perfectly rough spheres. J. Chem. Phys. 1965, vol. 42, No. 10.
3. *Чепмен С., Каулинг Т.* Математическая теория неоднородных газов. М., Изд-во иностр. лит., 1960.