

УДК 533.72

© 1995 г. В. С. ГАЛКИН

## О ПЕРЕНОСНЫХ СВОЙСТВАХ НЕРАВНОВЕСНЫХ СМЕСЕЙ МНОГОАТОМНЫХ ГАЗОВ

Показано, что известная поправка Гиршфельдера — Эйкена к коэффициенту теплопроводности смеси многоатомных газов, которая дается первым приближением по полиномам Сонина, может быть в 3,4 раза меньше соответствующего точного значения (для лоренцовой смеси легких молекул с тяжелыми, взаимодействующих по закону Кулона). Достаточно высокая точность достигается во втором приближении по полиномам Сонина. В рамках последнего найдены аналогичные поправки к неравновесным тепловому и диффузионным потокам. На основе обобщенного метода Чепмена — Энскога исследован более общий случай, когда при расчете коэффициентов переноса учитывается и часть интегралов неупругих столкновений. Коэффициенты переноса либо представлены через известные формулы для быстрых и замедленных обменов внутренней энергией молекул, либо для них получены удобные приближенные выражения.

1. Система уравнений неравновесной (релаксационной) газодинамики в отсутствие внешних сил имеет вид

$$\frac{Dn_{\Omega}}{Dt} + n_{\Omega} \nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{j} = R_{\Omega}, \quad \frac{D}{Dt} \equiv \frac{\partial}{\partial t} + u_j \frac{\partial}{\partial x_j} \quad (1.1)$$

$$\rho \frac{Du_i}{Dt} + \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial P_{ij}}{\partial x_j} = 0, \quad p = nkT, \quad i, j, k = 1, 2, 3$$

$$\rho \frac{D}{Dt} \left( \frac{3}{2} \frac{p}{\rho} + E \right) + p \nabla \mathbf{u} + P_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \nabla (q_i + q_E) = 0$$

$$\sum_{\Omega} m_{\Omega} R_{\Omega} = 0, \quad E = \frac{1}{\rho} \sum_{\Omega} E_{\Omega} n_{\Omega}, \quad \rho = \sum_{\Omega} m_{\Omega} n_{\Omega}, \quad n = \sum_{\Omega} n_{\Omega}$$

Индексами снизу  $\Omega \equiv N\omega$ ,  $\Psi \equiv M\psi$  и т. п. определяются сорт ( $N$ ,  $M = 1, 2, \dots, S$ , где  $S$  — число химических компонентов смеси) и внутреннее энергетическое состояние молекулы ( $\omega$ ,  $\psi = 1, 2, \dots, S_{NE}$ , где  $S_{NE}$  — число энергетических состояний  $N$ -молекулы). Заселенность  $n_{\Omega}$  есть плотность  $\Omega$ -частиц;  $\mathbf{u}$  — среднemasсовая скорость,  $\mathbf{j}_{\Omega} = n_{\Omega} \mathbf{V}_{\Omega}$ ,  $\mathbf{V}_{\Omega}$  — диффузионная скорость;  $R_{\Omega}$  — скорость образования  $\Omega$ -частиц из-за возбуждения внутренних степеней свободы молекул и химических реакций;  $P_{ij}$  — вязкие напряжения;  $m_{\Omega} \equiv m_N$  — масса молекулы;  $E$  — удельная внутренняя энергия газовой смеси;  $E_{\Omega}$  — внутренняя энергия  $N$ -молекулы в квантовом состоянии  $\omega$ ;  $q_i$ ,  $q_E$  — потоки поступательной и внутренней энергии;  $T$  — поступательная температура. Используется квазиклассическое приближение, согласно которому молекулы обладают только определенными дискретными значениями внутренней энергии; многоатомный газ рассматривается как смесь «газов» из молекул в различных квантовых состояниях.

Через одночастичные функции распределения  $f_{\Omega} = f(c_{\Omega}, E_{\Omega}, \mathbf{x}, t)$  входящие в (1.1) макропараметры определяются так

$$n_{\Omega} = \langle 1 \rangle, \quad \langle A \rangle = \int A f_{\Omega} dc_{\Omega}, \quad c_{\Omega} = \xi_{\Omega} - \mathbf{u}$$

$$n_N = \sum_{\omega} n_{\Omega}, \quad \mathbf{u} = \frac{1}{\rho} \sum_{\Omega} m_N \langle \xi_{\Omega} \rangle, \quad j_{\Omega} = \langle c_{\Omega} \rangle \quad (1.2)$$

$$P_{ij} = \sum_{\Omega} m_N \langle [c_{\Omega i} c_{\Omega j}] \rangle, \quad [A_{ij}] = \frac{1}{2} (A_{ij} + A_{ji}) - \frac{1}{3} \delta_{ij} A_{kk}$$

$$T = \frac{1}{3nk} \sum_{\Omega} m_N \langle c_{\Omega}^2 \rangle, \quad q_i = \sum_{\Omega} \frac{m_N}{2} \langle c_{\Omega} c_{\Omega}^2 \rangle, \quad q_E = \sum_{\Omega} E_{\Omega} j_{\Omega}$$

Для расчета переносных свойств  $j_{\Omega}$ ,  $P_{ij}$ ,  $q_i$  и источниковых слагаемых  $R_{\Omega}$  при произвольной неравновесности течения разработан обобщенный метод Чепмена — Энскога [1—6]. Физические ограничения метода обсуждались в [7, 8]. В первом приближении по числу Кнудсена  $\text{Kn} \ll 1$ , аналогичном приближению Навье — Стокса

$$f_{\Omega} = f_{\Omega}^{(0)} (1 + \varphi_{\Omega} + \varphi_{\Omega}^*), \quad |\varphi_{\Omega}| \ll 1, \quad |\varphi_{\Omega}^*| \ll 1 \quad (1.3)$$

$$f_{\Omega}^{(0)} = X_{\Omega} n_N (h_N/\pi)^{3/2} \exp(-w_{\Omega}^2), \quad w_{\Omega} = h_N^{1/2} c_{\Omega}$$

$$X_{\Omega} = n_{\Omega}/n_N, \quad \sum_{\Omega} X_{\Omega} = 1, \quad h_N = m_N/2kT$$

В дальнейшем принимается вариант [4, 5] обобщенного метода Чепмена — Энскога, когда  $n_{\Omega}$ ,  $u$ ,  $T$  рассчитываются по  $f_{\Omega}^{(0)}$ , т. е. не разлагаются в ряды по  $\text{Kn}$ . В (1.3)  $\varphi_{\Omega}^{(0)}$  — скалярная по  $c_{\Omega}$  составляющая возмущения функции распределения,  $\varphi_{\Omega}$  — векторная и тензорная составляющие, определяющие переносные свойства, рассмотрению которых посвящена данная работа (для  $R_{\Omega}$  на практике применяются полуэмпирические выражения). Функции  $\varphi_{\Omega}$  удовлетворяют следующей системе уравнений:

$$f_{\Omega}^{(0)} \left\{ 2 [w_{\Omega} w_{\Omega}] \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \left( w_{\Omega}^2 - \frac{5}{2} \right) c_{\Omega} \nabla \ln T + \frac{n}{n_{\Omega}} c_{\Omega} d_{\Omega} \right\} = I_{\Omega}^e(\varphi) + I_{\Omega}^{RS}(\varphi) \quad (1.4)$$

$$d_{\Omega} = X_{\Omega} d_N + \frac{n_N}{n} \nabla X_{\Omega}, \quad d_N = \nabla \frac{n_N}{n} + \left( \frac{n_N}{n} - \frac{m_N n_N}{\rho} \right) \nabla \ln p$$

В (1.4) использованы обозначения из (1.1) — (1.3),  $I^e(\varphi)$ ,  $I^{RS}(\varphi)$  — соответственно ли-неаризованный оператор упругих столкновений и самосопряженная часть [1, 2] линейаризованного оператора неупругих столкновений.

Представляя решения уравнений (1.4) рядами по полиномам Сонина и используя (1.2), легко найти формулы для переносных свойств с коэффициентами, выраженными через интегральные скобки. Однако эти формулы носят формальный характер ввиду недостаточности имеющейся информации о сечениях неупругих процессов. Коэффициенты переноса являются сложными функциями очень большого числа переменных  $n_{\Omega}$ ,  $T$ . Очевидно, что необходим поиск принципиальных упрощений. Этому были посвящены соответствующие разделы в [1, 3] и работа [8]. В статье представлено дальнейшее развитие приближенных методов теории переносных свойств смесей многоатомных газов, но не проводится аналогичный анализ соотношений Стефана — Максвелла [9].

## 2. Рассмотрим сначала простейший случай, когда в (1.4)

$$I^{RS}(\varphi)/I^e(\varphi) \sim \alpha \ll 1$$

т. е. вклад интегралов неупругих столкновений в коэффициенты переноса пренебрежимо мал. Предположим также, что сечения упругих столкновений молекул не зависят от их внутренних состояний (это предположение обсуждается в [8]). Тогда имеем [1, 3]

$$\varphi_{\Omega} = \varphi_N^e - Q_N^e c_N \nabla \ln X_{\Omega}, \quad Q_N^e = Q^e(w_N^2, n_N, T) \quad (2.1)$$

Индексом сверху  $e$  подчеркивается, что соответствующая величина рассчитывается по сечениям упругих столкновений и не зависит от неупругих процессов. Возмущение  $\varphi_N^e$  не зависит от  $X_{\Omega}$ ,  $E_{\Omega}$  и дается известным выражением для смеси одноатомных газов [6, 10]. Коэффициенты  $Q_N^e$  удовлетворяют уравнениям

$$f_N^{(0)} c_N = \sum_M \int f_N^{(0)} f_M^{(0)} (Q_N^e c_N - Q_N^{e'} c_N') g_{NM} d\sigma_{NM} dc_M \quad (2.2)$$

Здесь  $g_{NM}$  — относительная скорость,  $\sigma_{NM}$  — сечение упругого столкновения молекул  $N$  и  $M$ . Подставляя эти результаты в определения (1.2), с учетом (1.3) и формул

$$\sum_{\Omega} j_{\Omega} = j_N, \quad \sum_{\Omega} X_{\Omega} = 1 \quad (2.3)$$

находим [1, 3], что здесь  $P_{ij} = P_{ij}^e$ ,  $q_i = q_i^e$  и  $j_N = j_N^e$  такие же, как и в  $S$ -компонентной смеси одноатомных газов [6, 10].

Для определения  $j_{\Omega}$  необходимо знать  $Q_N^e$ . Решение уравнений (2.2) будем искать в виде ряда по полиномам Сонина

$$Q_N^e = \sum_{r=0}^{\infty} q_N^{(r)} S_{\frac{1}{2}}^{(r)}(w_N^2) \quad (2.4)$$

Подставим (2.4) в (2.2), умножим скалярно на  $w_N S_{\frac{1}{2}}^{(p)}(w_N^2)$  и проинтегрируем по  $c_N$ . Для вычисления коэффициентов  $q_N^{(p)}$  получим систему линейных уравнений

$$\beta_p = \sum_{r=0}^m q_N^{(r)} A_{N,N}^{rp}, \quad A_{N,N}^{rp} = \sum_M n_M [S_{\frac{1}{2}}^{(r)}(w_N^2) w_N, S_{\frac{1}{2}}^{(p)}(w_N^2) w_N]_{NM} \quad (2.5)$$

$$p = 0, 1, 2, \dots, m; \quad \beta_0 = 3/2; \quad \beta_{p \geq 1} = 0$$

Интегральные скобки  $[\dots]_{NM}$  определены в [10]. В частности

$$[w_N, w_N]_{NM} = \frac{3}{2} \frac{kT}{m m_N D_{NM}} (1)$$

где  $D_{NM}(1)$  — коэффициент бинарной диффузии одноатомных газов в первом (главном) приближении по полиномам Сонина.

Обозначим через  $q_N^{(0)}(1)$  и  $q_N^{(0)}(2)$  значения  $q_N^{(0)}$  при учете одного и двух членов разложения (2.4) соответственно. Используя формулы [10] для интегральных скобок, из (2.5) получим

$$q_N^{(0)}(1) = \frac{m_N}{kT} \left( \sum_M \frac{x_M}{D_{NM}} (1) \right)^{-1} \quad (2.6)$$

$$q_N^{(0)}(2) = \frac{3}{2} A_{N,N}^{11} (A_{N,N}^{00} A_{N,N}^{11} - A_{N,N}^{01} A_{N,N}^{10})^{-1} = q_N^{(0)}(1) (1 - \delta_N)^{-1} \quad (2.7)$$

В формулах (2.6), (2.7)

$$\delta_N = \frac{5}{4} \left\{ \sum_M \frac{x_M \mu_{MN}}{D_{NM}} (1) \left( 1 - \frac{2}{5} \frac{\Omega_{NM}^{(1,2)}}{\Omega_{NM}^{(1,1)}} \right) \right\}^2 \left\{ \sum_M \frac{x_M}{D_{NM}} (1) \sum_M \frac{x_M \mu_{MN}^2 R_{NM}}{D_{NM}} (1) \right\}^{-1} \quad (2.8)$$

$$R_{NM} = \frac{1}{4} \left( 5 + 6 \frac{m_N^2}{m_M^2} \right) + \frac{1}{5} \left( \Omega_{NM}^{(1,3)} - 5 \Omega_{NM}^{(1,2)} + 2 \frac{m_N}{m_M} \Omega_{NM}^{(2,2)} \right) / \Omega_{NM}^{(1,1)}$$

$$x_M = n_M / n, \quad \mu_{MN} = m_M / (m_N + m_M)$$

Через  $q_N^{(0)}$  определяются

$$j_{\Omega} = X_{\Omega} j_N^e - \sigma_N^e \nabla X_{\Omega}, \quad q_E = \sum_{\Omega} E_{\Omega} j_{\Omega} \quad (2.9)$$

$$\sigma_N^e = \frac{1}{3} \int f_N^{(0)} Q_N^e c_N^2 dc_N = \frac{n_N}{m_N} kT q_N^{(0)} \quad (2.10)$$

Если в отсутствие химических реакций  $X_{\Omega}$  есть больцмановская функция  $T$ , то из (2.6), (2.9), (2.10) получаем

$$q_E = \sum_N E_N j_N^e - \sum_N n_N D_{NN} (1) C_{vN} \left( \sum_M \frac{x_M D_{NN} (1)}{D_{NM}} (1) \right)^{-1} \nabla T \quad (2.11)$$

$$E_N = \sum_{\Omega} E_{\Omega} X_{\Omega} (T), \quad C_{vN} = \frac{dE_N}{dT}$$

В (2.11) коэффициент при  $\nabla T$  — известная поправка Гиршфельдера — Эйкена

к коэффициенту теплопроводности [10]. Если же  $X_\Omega$  зависит еще и от колебательных температур  $T_{NV}$ , то в (2.11) добавятся члены с  $\nabla T_{NV}$ .

Таким образом, указанная поправка получается в первом приближении по полиномам Сонина. Как показали сравнения расчетных и экспериментальных данных, точность поправки тем меньше, чем больше различия масс молекул смеси [11, 12]. Для оценки максимальной погрешности, обусловленной этим различием, рассмотрим лоренцову смесь [13] легкого и тяжелого газов, полагая  $N = 2$ ,  $M = 1$ . В этом случае  $m_2 \ll m_1$ ,  $n_2 \ll n_1$ ,  $c_2 \gg c_1$ , уравнение (2.2) принимает вид

$$f_2^{(0)} c_2 = \int f_1^{(0)} f_2^{(0)} Q_2^e(c_2) (c_2 - c_2') c_2 b d b d e d c_1$$

или, после интегрирования по  $c_1$

$$c_2 = n_1 Q_2^e(c_2) \int (c_2 - c_2') c_2 b d b d e$$

Это уравнение совпадает с уравнением (5.2) главы 10 книги [13] для  $-n_2 D_2(c_2)$ . Используя далее формулу (5.7) для  $D_{12}$  из этой главы и определение  $\sigma_N^e$  из (2.9), (2.10) находим, что

$$\sigma_2^e = (n_2/x_1) D_{12}$$

В [13] дана таблица точных и приближенных значений  $D_{12}$  для различных степенных межмолекулярных потенциалов. Для случаев кулоновского и максвелловского потенциалов и молекул — упругих сфер соответственно имеем следующие отношения точных значений  $\sigma_2^e$  к приближенным:

$$\sigma_2^e/\sigma_2^e(1) = 3,40; 1; 1,13, \quad \sigma_2^e/\sigma_2^e(2) = 1,04; 1; 1,04 \quad (2.12)$$

Здесь  $\sigma_2^e(1)$ ,  $\sigma_2^e(2)$  рассчитаны соответственно в первом и втором приближениях по полиномам Сонина, т. е. в нашем случае — по  $q_2^{(0)}(1)$ ,  $q_2^{(0)}(2)$ .

Как известно, отличия точных значений коэффициентов переноса от приближенных наиболее велики для лоренцовой смеси легких и тяжелых частиц, взаимодействующих по закону Кулона. В этом случае, согласно (2.12),  $\sigma_2^e(1)$  и, следовательно, поправка Гиршфельдера — Эйкена в 3,40 раза меньше точного значения ( $\sigma_2^e$ ), в то время как  $\sigma_2^e(2)$  — лишь в 1,04 раза. Точность  $\sigma_2^e(2)$  более высока в практически интересных случаях, когда отношения масс молекул конечны, а зависимости межмолекулярных потенциалов от расстояния имеют промежуточный вид (между указанными в (2.12) пределами).

Таким образом, достаточно высокой точностью в широкой области параметров обладает рассчитанная во втором приближении по полиномам Сонина величина  $\sigma_N^e(2)$ , даваемая формулами (2.10), (2.7), (2.8) и фигурирующая в выражениях (2.9). В отличие от данного здесь анализа, вывод приведенного в [11] множителя, уточняющего поправку Гиршфельдера — Эйкена при больших различиях масс молекул, носит полуэмпирический характер.

3. Перейдем теперь к более общему случаю, когда для части неупругих процессов (в первую очередь для вращений)

$$I^{RS}(\varphi)/I^e(\varphi) \sim \alpha_1 D_1$$

а для остальных это отношение порядка  $\alpha_2 \ll 1$  (колебания и химические реакции при энергиях возбуждения порядка  $kT$ ) и соответствующими интегралами неупругих столкновений в (1.4) пренебрегаем. Предположим также, что сечения  $\alpha_1$ -взаимодействий не зависят от  $\alpha_2$ -состояний. Обозначим энергетические уровни для  $\alpha_1$ - и  $\alpha_2$ -процессов через  $\omega_1$  и  $\omega_2$ , так что  $\Omega = N\omega_1\omega_2$ . Вместо (2.1) получаем [1, 3]

$$\varphi_\Omega = \varphi_{\Omega_1} - Q_{\Omega_1} c_{\Omega_1} \nabla \ln Y_\Omega, \quad \Omega_1 \equiv N\omega_1 \quad (3.1)$$

$$Q_{\Omega_1} = Q(c_{\Omega_1}^2, E_{\Omega_1}), \quad Y_\Omega = \frac{n_\Omega}{n_{\Omega_1}}, \quad n_{\Omega_1} = \sum_{\omega_2} n_\Omega, \quad \sum_{\omega_2} Y_\Omega = 1$$

Отметим, что в [1, 3] для сокращения обозначений вместо  $c_{N\omega_1}$  применялось обозначение  $c_N$ , аналогичные сокращения применялись в [8, 14]. Однако такая процедура может приводить к недоразумениям.

В (3.1)  $\varphi_{\Omega_1}$  — не скалярное возмущение функции распределения для смеси многоатомных газов из молекул, обладающих только  $\omega_1$ -уровнями (т. е. когда  $\alpha_2$ -процессы отсутствуют). Вычисляемые по (3.1) переносные свойства сложным образом зависят от  $E_{\Omega_1}$ ,  $n_{\Omega_1}$  и т. д. Однако эти зависимости можно упростить, применяя методику [8]. По предположению,  $\Omega_1$ -смесь характеризуется только одним параметром  $\alpha_1$ , определяющим меру неравновесности  $\omega_1$ -состояний. Для этого случая показано [8], что с погрешностью  $O(Kn)$  по сравнению с единицей

$$f_{\Omega_1}^{(0)}\varphi_{\Omega_1} = f_{\Omega_1, eq}^{(0)}\varphi_{\Omega_1, eq} + f_{\Omega_1, R}^{(0)}\varphi_{\Omega_1, R} - f_{\Omega_1, eq}^{(0)}\varphi_{\Omega_1, R}^{eq} \quad (3.2)$$

$$f_{\Omega_1, eq}^{(0)} = X_{\Omega_1, eq} (f_{\Omega_1}^{(0)}/X_{\Omega_1}), \quad X_{\Omega_1} = n_{\Omega_1}/n_N$$

Здесь  $X_{\Omega_1, eq} = X_{\Omega_1}(T)$  — бoльцмановская функция;  $\varphi_{\Omega_1, eq}$  — решение уравнений (1.4) для случая быстрых обменов ( $\alpha_1 = O(1)$ ),  $\varphi_{\Omega_1, R}$  — для случая замедленных обменов, когда  $\alpha_1 \ll 1$  и в (1.4) пренебрегается интегралами неупругих столкновений; если в  $\varphi_{\Omega_1, R}$  положить  $X_{\Omega_1} = X_{\Omega_1, eq}$ , то получим  $\varphi_{\Omega_1, R}^{eq}$ .

Используя (1.2), (3.1), (3.2), найдем выражения для переносных свойств, определяемых при помощи  $\varphi_{\Omega_1}$

$$P_{ij} = -2\mu_{eq} \left[ \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right], \quad \frac{j_{N, eq}}{n_N} = - \sum_M D_{N, eq}^M d_M - D_{TN, eq} \nabla \ln T \quad (3.3)$$

$$q_i = \frac{5}{2} k \sum_N j_{N, eq} - \lambda_{eq} \nabla T - p \sum_N D_{TN, eq} d_N$$

Здесь коэффициенты вязкости  $\mu_{eq}$ , парциальной теплопроводности  $\lambda_{eq}$ , диффузии  $D_{N, eq}^M$  и термодиффузии  $D_{TN, eq}$  вычисляются по известным формулам [14] для  $S$ -компонентной смеси многоатомных газов при быстрых межмолекулярных  $\alpha_1$ -обменах внутренней энергией. Величины  $d_N$  и  $j_N$  определены в (1.4), (2.3). Формулы (3.3) справедливы и для случая, рассмотренного в разд. 2, если коэффициенты переноса заменить их выражениями для смеси одноатомных газов.

Далее по методике [8] получаем также, что

$$j_{\Omega} = Y_{\Omega} j_{\Omega} - \sigma_{\Omega} \nabla Y_{\Omega}, \quad \sigma_{\Omega} = \frac{1}{3} \int f_{\Omega_1}^{(0)} Q_{\Omega_1} c_{\Omega_1}^2 d c_{\Omega_1} \quad (3.4)$$

$$j_{\Omega_1} \equiv \sum_{\omega_2} j_{\Omega} = j_{\Omega_1, eq} + (X_{\Omega_1} - X_{\Omega_1, eq}) j_N^* - \sigma_N^* \nabla (X_{\Omega_1} - X_{\Omega_1, eq}) \quad (3.5)$$

Формула для  $j_{\Omega_1, eq}$  имеет тот же вид, что и для  $j_{N, eq}$  (см. (3.3)), однако коэффициенты зависят еще и от индекса  $\omega_1$ . В (3.5)  $j_N^*$  даются известными формулами для  $S$ -компонентной смеси одноатомных газов,  $\sigma_N^*$  — формулой (2.10). Остается определить входящий в (3.4) коэффициент  $\sigma_{\Omega_1}$ .

При сформулированных предположениях для  $Q_{\Omega_1}$  справедливо уравнение [1, 3]

$$f_{\Omega_1}^{(0)} c_{\Omega_1} = \sum_{M \Psi_1 \nu_1} \int \frac{\Gamma}{2} (Q_{\Omega_1} c_{\Omega_1} - Q_{\Delta_1} c_{\Delta_1}) g_{\Omega_1 \Psi_1} d \sigma_{\Omega_1 \Psi_1}^{\Delta_1} d c_{\Psi_1} \quad (3.6)$$

$$\Gamma = \frac{S_{\Omega_1} S_{\Psi_1}}{S_{\Delta_1} S_{\Lambda_1}} f_{\Delta_1}^{(0)} f_{\Lambda_1}^{(0)} + f_{\Omega_1}^{(0)} f_{\Psi_1}^{(0)}, \quad \Psi_1 = M \psi_1, \quad \Delta_1 = N \nu_1, \quad \Lambda_1 = M \eta_1$$

Через  $S$  обозначены статистические веса,  $g_{\Omega_1 \Psi_1}$  — относительная скорость сталкивающихся молекул,  $\sigma$  — сечение неупругого столкновения, когда  $\Omega_1 + \Psi_1 \rightarrow \Delta_1 + \Lambda_1$ .

Для упрощения задачи применим правило (3.2). Получим

$$Q_{\Omega_1} = Z_{\Omega_1} Q_{\Omega_1, eq} + Q_N^e (1 - Z_{\Omega_1}), \quad Z_{\Omega_1} = X_{\Omega_1, eq} / X_{\Omega_1} \quad (3.7)$$

Величина  $Q_N^e$  вычислена в предыдущем разделе. Для  $Q_{\Omega_1, eq}$  уравнение (3.6) приобретает вид

$$f_{\Omega_1, eq}^{(0)} c_{\Omega_1} = \sum_{M \Psi_1 \eta_1} \int f_{\Omega_1, eq}^{(0)} f_{\Psi_1, eq}^{(0)} (Q_{\Omega_1, eq} c_{\Omega_1} - Q_{\Delta_1, eq} c_{\Delta_1}') g_{\Omega_1 \Psi_1} d\sigma_{\Omega_1 \Delta_1}^{\Delta_1} d c_{\Psi_1} \quad (3.8)$$

Решение уравнений (3.8) можно искать в виде суммы произведений полиномов Сонина и Вальдмана — Трюбенбахера [14]

$$Q_{\Omega_1, eq} = \sum_{n, m=0}^{\infty} q_{\Omega_1}^{(n, m)} S_{\frac{1}{2}}^{(n)} (w_{\Omega_1}^2) P^{(m)} (E_{\Omega_1} / kT) \quad (3.9)$$

где  $q_{\Omega_1}^{(nm)}$  не зависят от  $w_{\Omega_1}^2, E_{\Omega_1}$ .

Чтобы получить результат, выраженный через измеряемые в опыте величины, ограничимся первым слагаемым суммы (3.9), т. е. положим  $Q_{\Omega_1, eq} = q_{\Omega_1}^{(00)} (1)$ . Умножая (3.8) скалярно на  $w_{\Omega_1}$ , суммируя по  $\omega_1$  и интегрируя по  $c_{\Omega_1}$ , найдем  $q_{\Omega_1}^{(00)} (1)$ . Полученное выражение совпадает с (2.6), если в этой формуле заменить  $D_{NM} (1)$  на  $D_{NM, eq} (1)$  — коэффициент бинарной диффузии в газах из молекул с уровнями  $\omega_1$  в низшем приближении по полиномам. В итоге

$$\sigma_{\Omega_1} = n_{\Omega_1} \frac{kT}{m_1} [Z_{\Omega_1} q_{\Omega_1}^{(00)} (1) + q_N^{(0)} (1) (1 - Z_{\Omega_1})] \quad (3.10)$$

$$q_{\Omega_1}^{(00)} (1) = \frac{m_N}{kT} \left( \sum_M \frac{x_M}{D_{NM, eq} (1)} \right)^{-1}$$

Здесь  $q_N^{(0)} (1)$  дается формулой (2.6). Чтобы учесть случай больших различий масс молекул, в (3.10) можно заменить  $D_{NM, eq} (1)$  на  $D_{NM, eq} (1) (1 - \delta_N)$ , а  $q_N^{(0)} (1)$  на  $q_N^{(0)} (2)$ , применяя формулы (2.8), (2.7). Величина  $Z_{\Omega_1}$  определена в (3.7),  $\Omega_1 \equiv N\omega_1$ .

Таким образом, для рассмотренного случая получены более простые выражения для переносных свойств (3.3)—(3.5), (3.10). Дальнейшие упрощения можно получить, применяя поправки Мэсона — Мончика к коэффициентам переноса для случая быстрых обменов внутренней энергией молекул.

Автор благодарен Н. К. Макашеву за ценные замечания.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 93-013-16407).

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Галкин В. С., Коган М. Н., Макашев Н. К. Обобщенный метод Чепмена — Энскога. Ч. 1. Уравнения неравновесной газовой динамики // Уч. зап. ЦАГИ. 1974. Т. 5. № 5. С. 66—76.
2. Галкин В. С., Коган М. Н., Макашев Н. К. Обобщенный метод Чепмена — Энскога // Докл. АН СССР. 1975. Т. 220. № 2. С. 304—307.
3. Kogan M. N., Galkin V. S., Makashev N. K. Generalized Chapman — Enskog method: derivation of the non-equilibrium gasdynamic equations // Rar. Gas Dynam. Pap. 11th Int. Symp., Cannes, 1978. V. 2. Paris, 1979. P. 693—734.
4. Мацук В. А., Рыков В. А. О методе Чепмена — Энскога для смеси газов // Докл. АН СССР. 1977. Т. 233. № 1. С. 49—51.

5. *Мацук В. А.* О методе Чепмена — Энскога для химически реагирующей газовой смеси с учетом внутренних степеней свободы//Журн. вычисл. математики и мат. физики. 1978. Т. 18. № 4. С. 1043—1048.
6. *Алексеев Б. В.* Математическая кинетика реагирующих газов. М.: Наука, 1982. 420 с.
7. *Макашев Н. К.* О методах вывода уравнений газовой динамики в случае высокопороговых реакций//Журн. вычисл. математики и мат. физики. 1986. Т. 26. № 10. С. 1512—1526.
8. *Галкин В. С., Макашев Н. К.* Вычисление переносных свойств многоатомных газов при произвольной неравновесности течения//Журн. вычисл. математики и мат. физики. 1989. Т. 29. № 6. С. 867—877.
9. *Галкин В. С., Макашев Н. К.* Модификация первого приближения метода Чепмена — Энскога для смеси газов//Изв. РАН. МЖГ. 1992. № 4. С. 178—185.
10. *Гиршфельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р.* Молекулярная теория газов и жидкостей. М.: Изд-во иностр. лит., 1961. 929 с.
11. *Kestin J., Wakeham W. A.* Thermal conductivity of mixtures of polyatomic gases at low and moderate density//Intern. J. Thermophys. 1983. V. 4. № 4. P. 295—309.
12. *Uribe F. J., Mason E. A., Kestin J.* Composition dependence of the thermal conductivity of low-density polyatomic gas mixtures//Intern. J. Thermophys. 1991. V. 12. № 1. P. 43—51.
13. *Чепмен С., Каулинг Т.* Математическая теория неоднородных газов. М.: Изд-во иностр. лит., 1960. 510 с.
14. *Monchick L., Yun K. S., Mason E. A.* Formal kinetic theory of transport phenomena in polyatomic gas mixtures//J. Chem. Phys. 1963. V. 39. № 3. P. 654—669.

Москва

Поступила в редакцию  
I.XII.1993