

УДК 533.72

© 2004 г. А. Б. ПОДДОСКИН

## ВЛИЯНИЕ НЕУПРУГИХ СТОЛКНОВЕНИЙ НА КОЭФФИЦИЕНТЫ СКОЛЬЖЕНИЯ ПЕРВОГО ПОРЯДКА ДВУХАТОМНОГО ГАЗА С ВРАЩАТЕЛЬНЫМИ СТЕПЕНЯМИ СВОБОДЫ

При решении задач динамики неоднородных газов в режиме со скольжением необходимо знать граничные условия для скорости, температуры, потоков тепла и др., т.е. граничные условия для макропараметров газа. В частности, подобные задачи возникают при построении теории термофореза умеренно крупных аэрозольных частиц [1].

Задаче скольжения одноатомного и молекулярного (двух- и многоатомного) газов вдоль граничной поверхности посвящено значительное количество работ (см., например, [2–8]). К эффектам первого порядка относятся изотермическое и тепловое скольжения газа, которые характеризуются кинетическими коэффициентами  $C_m$  и  $K_{TS}$  соответственно.

Отличие от простого (одноатомного) газа молекулы двухатомного и многоатомного газов обладают внутренними степенями свободы, что существенно усложняет кинетическое уравнение [9]. Отсутствие надежных моделей потенциала межмолекулярного взаимодействия приводит к необходимости построения модельных кинетических уравнений [10].

В настоящей работе предложено модельное кинетическое уравнение для двухатомного газа с вращательными степенями свободы молекул, которое получено путем развития подхода [6]. С применением этого модельного уравнения решена задача о скольжении двухатомного газа вдоль плоской поверхности. В результате получены коэффициенты  $C_m$  и  $K_{TS}$  для двухатомных газов, которые зависят от теплофизических параметров газа и интенсивности неупругих столкновений.

*Ключевые слова:* модельное кинетическое уравнение, функция распределения, коэффициенты скольжения, неупругие столкновения.

**1. Модельное кинетическое уравнение.** Для стационарной задачи, которая далее и будет рассматриваться, в линейной постановке, функцию распределения для молекул двухатомного газа можно записать в виде [6]:

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, \boldsymbol{\omega}) = f_0(1 + \Phi(\mathbf{r}, \mathbf{v}, \boldsymbol{\omega})),$$

$$f_0 = n_0 \left( \frac{m}{2\pi k T_0} \right)^{3/2} \left( \frac{I}{k T_0} \right) \exp \left( - \frac{m v^2}{2k T_0} - \frac{I \boldsymbol{\omega}^2}{2k T_0} \right) \quad (1.1)$$

Здесь  $f_0$  – равновесная максвелловская функция распределения,  $I$  – момент инерции молекулы,  $m$ ,  $\mathbf{v}$  и  $\boldsymbol{\omega}$  – масса, линейная и угловая скорости молекулы,  $k$  – постоянная Больцмана,  $T_0$  – равновесная температура газа.

Нормировка  $f_0$  соответствует соотношению

$$n_0 = \int f_0 d^3 v d\boldsymbol{\omega}$$

где  $n_0$  – числовая равновесная концентрация молекул газа.

В настоящей работе предлагается модельное кинетическое уравнение для двухатомного газа, с учетом вращательных степеней свободы, в виде:

$$\mathbf{c} \cdot \nabla \Phi = \varepsilon (\mathbf{v} + (c^2 + c_\omega^2 - 5/2)\boldsymbol{\tau} + 2(\mathbf{c}\mathbf{G}) +$$

$$+ \xi_1(\mathbf{c}\mathbf{Q}^t)(c^2 - 5/2) + \xi_2(\mathbf{c}\mathbf{Q}^r)(c_\omega^2 - 1) - \Phi \quad (1.2)$$

$$c^2 = \frac{mv^2}{2kT_0}, \quad c_\omega^2 = \frac{I\omega^2}{2kT_0}, \quad v = \frac{n-n_0}{n_0}, \quad \tau = \frac{T-T_0}{T_0}$$

где  $v$ ,  $\tau$  отклонения от равновесных значений концентрации и температуры,  $\mathbf{G} = \sqrt{m/2kT_0}\mathbf{u}$  – безразмерная скорость,  $\mathbf{Q}^t$  и  $\mathbf{Q}^r$  – безразмерные составляющие потока тепла, связанные с переносом поступательной (трансляционной) энергии молекул и переноса вращательной (ротационной) энергии,  $\varepsilon$ ,  $\xi_1$ ,  $\xi_2$  – свободные параметры модели.

В отличие от модели [6] в (1.2) “разведены” потоки  $\mathbf{Q}^t$  и  $\mathbf{Q}^r$ , при этом появляется дополнительный параметр  $\xi_2$ .

С использованием обозначения [6]

$$(\Phi, \Psi) = \int e^{-c^2 - c_\omega^2} \Phi \Psi \frac{d^3c}{\pi^{3/2}} dc_\omega^2 \quad (1.3)$$

моменты  $v$ ,  $\tau$ ,  $\mathbf{G}$ ,  $\mathbf{Q}^t$ ,  $\mathbf{Q}^r$  могут быть представлены в виде

$$v = (1, \Phi), \quad \tau = \frac{2}{5}((c^2 + c_\omega^2 - 5/2), \Phi), \quad \mathbf{G} = (\mathbf{c}, \Phi)$$

$$\mathbf{Q}^t = (\mathbf{c}(c^2 - 5/2), \Phi), \quad \mathbf{Q}^r = (\mathbf{c}(c_\omega^2 - 1), \Phi)$$

Применяя метод Чепмена – Энскога к уравнению (1.2) и ограничиваясь при этом приближением первого порядка, приходим к функции распределения вида

$$f_{Ch} = f_0(1 + v + (c^2 + c_\omega^2 - 5/2)\tau + 2c_\alpha G_\alpha + \Phi_{Ch})$$

$$\Phi_{Ch} = a_1 c_\alpha g_\alpha (5/2 - c^2) + a_2 c_\alpha g_\alpha (1 - c_\omega^2) - b_1 c_\alpha c_\beta \Pi_{\alpha\beta}, \quad (1.4)$$

$$g_\alpha = \frac{\partial T}{T_0 \partial x_\alpha}, \quad \Pi_{\alpha\beta} = \sqrt{\frac{m}{2kT_0}} \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha}$$

Здесь по повторяющимся греческим индексам проводится суммирование.

Функция распределения (1.4) совпадает с функцией распределения Чепмена – Энскога [9]. Параметры модели (1.2)  $\varepsilon$ ,  $\xi_1$ ,  $\xi_2$  связаны с  $a_1$ ,  $a_2$ ,  $b_1$  соотношениями

$$\varepsilon = \frac{2}{b_1}, \quad \xi_1 = \frac{4}{5} \left(1 - \frac{b_1}{2a_1}\right), \quad \xi_2 = 2 \left(1 - \frac{b_1}{2a_2}\right)$$

Найдем с помощью функции (1.4) потоки тепла и тензор напряжений

$$q'_\alpha = P_0 \sqrt{\frac{2kT_0}{m}} Q'_\alpha, \quad q^r_\alpha = P_0 \sqrt{\frac{2kT_0}{m}} Q^r_\alpha, \quad q_\alpha = q'_\alpha + q^r_\alpha$$

$$p_{\alpha\beta} = 2P_0(c_\alpha c_\beta, \Psi_{Ch}) = 2P_0 \tau_{\alpha\beta}^{Ch}$$

$$\tau_{\alpha\beta}^{Ch} = -\frac{1}{2} b_1 \Pi_{\alpha\beta}, \quad Q'_\alpha = -\frac{5}{4} a_1 g_\alpha, \quad Q^r_\alpha = -\frac{1}{2} a_2 g_\alpha$$

Сравнивая последние с гидродинамическим определением тензора напряжений (закон Ньютона) и вектора теплового потока (закон Фурье), находим

$$b_1 = \frac{4\mu}{\rho_0} \sqrt{\frac{m}{2kT_0}} = \frac{4\lambda}{\sqrt{\pi}}, \quad a_1 = \frac{4T_0}{5P_0} \sqrt{\frac{m}{2kT_0}} \kappa^t$$

$$a_2 = 2 \frac{T_0}{P_0} \sqrt{\frac{m}{2kT_0}} \kappa^r, \quad \lambda = \frac{\mu}{\rho_0} \sqrt{\frac{\pi m}{2kT_0}}$$

где  $\mu$  – коэффициент динамической вязкости,  $\kappa^t$  и  $\kappa^r$  – коэффициенты переноса поступательной и внутренней (вращательной) энергии,  $\lambda$  – средняя длина свободного пробега молекул газа.

Если воспользоваться определением полного  $f$ , парциальных (поступательного)  $f^t$  и (внутреннего)  $f^r$  факторов Эйкана [9]

$$f = \frac{\kappa}{c_v \mu}, \quad f^t = \frac{\kappa^t}{c_v^t \mu}, \quad f^r = \frac{\kappa^r}{c_v^r \mu}$$

где  $c_v$  – удельная теплоемкость при постоянном объеме,  $c_v^t$  и  $c_v^r$  – удельные теплоемкости обусловленные энергией поступательного движения и внутренней (вращательной) энергией молекул, то параметры модели  $\xi_1, \xi_2$  можно записать в виде

$$\xi_1 = \frac{4}{5} \left(1 - \frac{5}{3f^t}\right), \quad \xi_2 = 2 \left(1 - \frac{1}{f^r}\right)$$

В [11] были получены  $f^t, f^r, f$  и они имеют следующий вид

$$f^t = \frac{5}{2} - \frac{10}{3\pi k Z \delta} \left(\frac{5}{2} - \beta^r\right), \quad f^r = \beta^r \left[1 + \frac{2}{k Z \delta} \left(\frac{5}{2} - \beta^r\right)\right]$$

$$f = \frac{15}{4} \frac{k}{c_v} + \frac{c_v^r}{c_v} \beta^r - \frac{2c_v^r}{\pi Z \delta} \left(\frac{5}{2} - \beta^r\right)^2, \quad \delta = 1 + \frac{2}{\pi Z} \left(\beta^r + \frac{5c_v^r}{3k}\right), \quad Z = \frac{16\tau_{rt}}{5\pi\tau_c}$$
(1.5)

Формулы Мэсона – Мончика (1.5) справедливы в общем случае вращательно-колебательно-возбужденных молекул. В то же время в настоящей работе внутренним степеням свободы соответствуют только вращательные, поэтому в формулах (1.5) обозначено:  $Z$  – число неупругих столкновений или интенсивность обмена энергией между поступательными и внутренними (вращательными) степенями свободы,  $\tau_c^{-1}$  – частота упругих столкновений,  $\tau_{rt}^{-1}$  – частота неупругих столкновений, сопровождающаяся обменом энергии между вращательными и поступательными степенями свободы ( $RT$ -обмен);  $\beta^r = \rho D^r / \mu$ ,  $D^r$  – коэффициент диффузии внутренней энергии молекул. Следует иметь в виду [9], что  $Z \geq 1$ , причем  $Z \sim 1$  соответствует легкому, а  $Z \gg 1$  – замедленному обмену энергией между поступательными и внутренними степенями свободы.

Для проведения конкретных расчетов можно воспользоваться экспериментальными данными коэффициентов переноса и теплоемкости (см., например, [12]), а значения интенсивности обмена энергией  $Z$  – из результатов ультразвуковых измерений [13, 14] или использовать формулы указанных величин, полученные в рамках других теорий (см. [9]).

Параметры  $\xi_1, \xi_2$  в уравнении (1.2) определяются величиной факторов Эйкена  $f^t, f^r$ , а значит, параметры модели (1.2) однозначно определены. Легко проверить, что из модели (1.2) получаются все законы сохранения.

**2. Скольжение двухатомного газа.** Рассмотрим задачу о скольжении двухатомного газа вдоль плоской поверхности. Направим ось  $X$  декартовой системы координат перпендикулярно поверхности, а ось  $Y$  – вдоль поверхности, в направлении градиента температуры. Вдали от поверхности, вне слоя Кнудсена, газ описывается функцией распределения Чепмена – Энскога, которая в условиях поставленной задачи имеет вид

$$f_{Ch} = f_0(1 + \Psi_{Ch}) = f_0(1 + 2c_y G_y(\infty) - b_1 c_x c_y \Pi_{xy} - a_1(c^2 - 5/2)c_y g_y - a_2(c_\omega^2 - 1)c_y g_y) \quad (2.1)$$

Параметр  $G_y(\infty)$  представляет собой скорость газа вне слоя Кнудсена, которая и является скоростью скольжения [15].

Около поверхности функция распределения отличается от (2.1) из-за рассеяния молекул газа поверхностью, поэтому, обозначая через  $\Phi$  функцию, описывающую поведение газа в слое Кнудсена, имеем

$$f = f_0(1 + \Psi_{Ch} + \Phi) \quad (2.2)$$

В условиях настоящей задачи модельное кинетическое уравнение (1.2) для  $\Phi$  принимает вид

$$c_x \frac{d\Phi}{dx_0} = 2G_y c_y + \xi_1 Q_y^t c_y \left( c^2 - \frac{5}{2} \right) + \xi_2 Q_y^r c_y (c_\omega^2 - 1) - \Phi \quad (2.3)$$

где  $x_0 = \epsilon x$ .

Задача решается общеизвестным методом полупространственных моментов (см., например, [6]), при этом функция  $\Phi$  ищется в виде

$$\Phi = \eta(+)\cdot\Phi^+ + \eta(-)\cdot\Phi^- \\ \eta(\pm) = \frac{1}{2}(1 \pm \text{sign } c_x) \quad (2.4)$$

$$\Phi^\pm = c_y a_0^\pm(x) + c_x c_y a_1^\pm(x) + c_y (c^2 - 5/2) a_2^\pm(x) + c_y (c_\omega^2 - 1) a_3^\pm(x)$$

Система моментных уравнений получается с использованием (2.4) обычным образом (см., например, [6]), в результате решение имеет вид

$$a_k^\pm(x_0) = A_1 \alpha_k^\pm \exp(-\rho_1 x_0) + A_2 \beta_k^\pm \exp(-\rho_2 x_0), \quad k = 0, 1, 2 \quad (2.5)$$

$$a_3^\pm(x_0) = A_3 \gamma^\pm \exp(-\rho_3 x_0), \quad (2.6)$$

Подстановка (2.5) в систему моментных дифференциальных уравнений дает систему однородных линейных алгебраических уравнений, нетривиальное решение которой возможно при некоторых определенных значениях параметров  $\rho_1, \rho_2$ . Последние и коэффициенты  $\alpha_i^\pm, \beta_i^\pm$  ( $i = 0, 1, 2$ ), в свою очередь, зависят от  $\xi_1, \xi_2$ . Параметр

$$\rho_3 = \sqrt{\pi(2 - \xi_2)/2}, \quad \gamma^\pm = [\sqrt{2/(2 - \xi_2)} \pm 1]$$

Функции  $a_3^\pm(x_0)$  не дают вклад в скольжение газа, а определяют составляющую  $q^r$  потока тепла. Здесь  $A_1, A_2, A_3$  – некоторые константы, значения которых определяются из кинетических граничных условий.

В качестве граничных условий для функции распределения используется зеркально-диффузная модель. В результате находим скорость скольжения газа  $G_y(\infty)$  и коэффициенты скольжения  $K_{TS}$  и  $C_m$ , в виде

$$G_y(\infty) = K_{TS} \sqrt{\frac{2kT_0}{m}} \frac{\mu}{\rho_0 T_0} \frac{dT}{dx} + C_m \lambda \Pi_{xy},$$

$$K_{TS} = f' \frac{3\Delta_1}{5\Delta_0} \quad (2.7)$$

$$C_m = \frac{2-q}{q} \frac{2\Delta_2}{\sqrt{\pi}\Delta_0} \quad (2.8)$$

$$\Delta_0 = [\alpha_1^+ + (1-q)\alpha_1^-][\beta_2^+ - (1-q)\beta_2^-] - [\beta_1^+ + (1-q)\beta_1^-][\alpha_2^+ - (1-q)\alpha_2^-]$$

$$\Delta_1 = [\alpha_0^+ - (1-q)\alpha_0^-][\beta_1^+ + (1-q)\beta_1^-] + [\beta_0^+ - (1-q)\beta_0^-][\alpha_1^+ + (1-q)\alpha_1^-]$$

$$\Delta_2 = [\beta_0^+ - (1-q)\beta_0^-][\alpha_2^+ - (1-q)\alpha_2^-] - [\alpha_0^+ - (1-q)\alpha_0^-][\beta_2^+ - (1-q)\beta_2^-]$$

**3. Анализ результатов.** Полученные коэффициенты скольжения двухатомного газа зависят от теплоемкостей  $c_v^t$ ,  $c_v^r$  коэффициентов переноса, числа неупругих столкновений  $Z$  и от коэффициента аккомодации тангенциального импульса  $q$ .

В случае чисто упругих столкновений молекул газа друг с другом  $Z^{-1} \rightarrow 0$ . Если, кроме того, формально положить  $\beta^r = 0$ , то получится переход к одноатомному газу. В этом случае (2.7) и (2.8) переходят в выражения для коэффициентов теплового и изотермического скольжения одноатомного газа, полученные в приближении кинетической  $S$  – модели [8]. При этом

$$\alpha_0^+ = 1, \quad \alpha_0^- = 0.5182, \quad \alpha_1^+ = -0.2787, \quad \alpha_1^- = 0.1890, \quad \alpha_2^+ = 0.8975,$$

$$\alpha_2^- = -0.0929; \quad \beta_0^+ = 1, \quad \beta_0^- = 0.1810, \quad \beta_1^+ = -1.1165, \quad \beta_1^- = 0.0945,$$

$$\beta_2^+ = 0.1794, \quad \beta_2^- = -0.0060; \quad \rho_1 = 1.2560, \quad \rho_2 = 2.1431$$

Используя эти параметры, находим численные значения коэффициентов теплового и изотермического скольжений 1.194 и 1.155 соответственно, что полностью совпадает с результатом, приведенным в [8].

При проведении расчетов коэффициентов скольжения (2.7) и (2.8) использована формула Сандлера [16] для коэффициента диффузии  $D^r$ :

$$D^r = D_0 \left( 1 + \frac{0.27}{Z} - \frac{0.44}{Z^2} - \frac{0.90}{Z^3} \right)$$

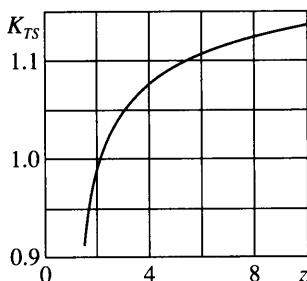
Здесь  $D_0$  – коэффициент самодиффузии газа. В этом случае

$$\beta^r = 1.2 \left( 1 + \frac{0.27}{Z} - \frac{0.44}{Z^2} - \frac{0.90}{Z^3} \right)$$

Анализ (2.8) показывает, что коэффициент изотермического скольжения слабо зависит от  $Z$ . В диапазоне изменения  $Z \in [1.5, \infty)$  газокинетический коэффициент  $C_m$

(при  $q = 1$ ) изменяется от 1.153 до 1.155. В то же время коэффициент теплового скольжения (2.7) существенно зависит от интенсивности неупругих столкновений. В указанном диапазоне изменения  $Z$  газокинетический коэффициент  $K_{TS}$  (при  $q = 1$ ) изменяется от 0.911 до 1.194, что составляет примерно на 30%.

В отличие от результатов, полученных в [6], в данной работе удается проанализировать зависимость коэффициента теплового скольжения от интенсивности неупругих столкновений.



Зависимость коэффициента теплового скольжения  $K_{TS}$  от числа неупругих столкновений  $Z$

Как следует из результатов ультразвуковых измерений, для некоторых двухатомных газов число неупругих столкновений  $Z$  монотонно возрастает с увеличением температуры [13, 14]. В частности, для азота, окиси углерода и кислорода в интервале температур от 100 до 1000 К параметр  $Z$  изменяется от 2 до 10. На фигуре 1 представлен график зависимости  $K_{TS}$  двухатомных газов от  $Z$  при условии полной аккомодации  $q = 1$ .

**Закключение.** Предложено модельное кинетическое уравнение, в котором учтены вращательные степени свободы молекул двухатомного газа, а свободные параметры модели выражены через парциальные факторы Эйкена.

В рамках этой модели решена задача о скольжении двухатомного газа вдоль плоской поверхности. Получены коэффициенты теплового и изотермического скольжения в виде функций, зависящих от числа неупругих столкновений молекул друг с другом, коэффициентов переноса и коэффициента аккомодации тангенциального импульса.

Неупругие столкновения оказывают более сильное влияние на теплое скольжение, оставляя изотермическое скольжение практически неизменным. Это связано с тем, что увеличение обмена энергией между поступательными и вращательными степенями свободы молекул сильнее влияет на тепловые свойства газа, чем на вязкостные.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Поддоскин А.Б., Юшканов А.А., Яламов Ю.И. К вопросу о термофорезе умеренно крупных аэрозольных частиц // Ж. техн. физики. 1980. Т. 50. № 1. С. 158–161.
2. Sone Y. Thermal creep in rarefied gas // J. Phys. Soc. Japan 1966. V. 21. № 9. P. 1836–1837.
3. Ивченко И.Н., Яламов Ю.И. Кинетическая теория течения газа, находящегося над твердой стенкой в поле градиента скорости // Изв. АН СССР. МЖГ. 1968. № 6. С. 139–143.
4. Яламов Ю.И., Поддоскин А.Б., Юшканов А.А. О граничных условиях при обтекании неоднородно нагретым газом сферической поверхности малой кривизны // Докл. АН СССР. 1980. Т. 254. № 2. С. 343–346. № 6. С. 498–502.

5. *Loyalka S.K.* Temperature jump and thermal creep slip: Rigid sphere gas // *Phys. Fluids*. 1989. V. A1. № 2. P. 403–408.
6. Поддоскин А.Б., Юшканов А.А. Скольжение двухатомного газа вдоль плоской поверхности // *Изв. РАН. МЖГ*. 1998. № 5. С. 182–189.
7. Поддоскин А.Б., Юшканов А.А., Яламов Ю.И. О коэффициентах скольжения и скачка макропараметров двухатомного газа с вращательными степенями свободы на слабо искривленной сферической поверхности // *Изв. РАН. МЖГ*. 2000. № 1. С. 163–173.
8. Поддоскин А.Б., Юшканов А.А., Яламов Ю.И. О скольжении и скачках макропараметров многоатомного газа с вращательными степенями свободы на слабо искривленной сферической поверхности // *Изв. РАН. МЖГ*. 2001. № 5. С. 194–202.
9. Жданов В.М., Алиевский М.Я. Процессы переноса и релаксации в молекулярных газах. М.: Наука, 1989. 335 с.
10. Рыков В.А. Модельное кинетическое уравнение для газа с вращательными степенями свободы // *Изв. АН СССР МЖГ*. 1975. № 6. С. 107–115.
11. *Mason E.A., Monchick L.* Heat conductivity of polyatomic and polar gases // *J. Chem. Phys.* 1962. V. 36. № 6. P. 1622–1639.
12. Варгафтик Н.Б. Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей. М.: Наука, 1972. 720 с.
13. *Carnevale E.H., Carey C., Larson G.* Ultrasonic determination of rotational collision numbers and vibrational relaxation times of polyatomic gases at high temperatures // *J. Chem. Phys.* 1967. V. 47. № 8. P. 2829–2835.
14. *Prangma G.J., Alberga A.H., Beenakker J.J.M.* Ultrasonic determination of the volume viscosity of  $N_2$ , CO,  $CH_4$  and  $CD_4$  between 77 and 300 K // *Physica*. 1973. V. 64. № 2. P. 278–288.
15. Черчиньяни К. Теория и приложения уравнения Больцмана. М.: Мир, 1978. 495 с.
16. *Sandler S.I.* Thermal conductivity of polyatomic gases // *Phys. Fluids*. 1968. V. 11. № 12. P. 2549–2555.

Москва

Поступила в редакцию  
29.1.2004