МЕХАНИКА
ЖИДКОСТИ И ГАЗА
№ 4 • 2005

УДК 533.72

© 2005 г. В. С. ГАЛКИН, С. В. РУСАКОВ

О ТОЧНОСТИ МОДИФИЦИРОВАННОЙ ПОПРАВКИ ЭЙКЕНА К КОЭФФИЦИЕНТУ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ГАЗОВ

Результаты вычисления теплопроводности девяти молекулярных газов низкой плотности N_2, O_2, NO, CO, CO_2, N_2O, CH_4, CF_4, SF_6, полученные при использовании модифицированной поправки Эйкена, сравниваются с эталонными результатами.

Ключевые слова: молекулярные газы, теплопроводность, приближение Эйкена.

Под газом низкой плотности здесь понимается идеальный газ, удовлетворяющий уравнению состояния Клайперона–Менделеева.

Результаты кинетической теории переносных свойств газов [1, 2] широко используются в различных приложениях, в том числе в высокотемпературной газодинамике [3]. Влияние внутренних степеней свободы молекул на коэффициенты переноса учитываются как правило в приближении Эйкена, т.е. при помощи поправки к значению коэффициента теплопроводности, справедливому для одноатомного газа [1, 4]. Вопросы применимости этого приближения имеют важное практическое значение, к ним необходимо обращаться вновь и вновь по мере накопления новых экспериментальных, расчетных и теоретических данных.

Для оценки точности модифицированной поправки Эйкена ниже в качестве эталонных результатов используются представленные в [2, 5] полуэмпирические формулы для теплопроводности неполярных газов – итог многолетней деятельности ряда зарубежных ученых по получению и обработке таких данных. При помощи этих формул рассчитаны [2] рекомендуемые значения числа Прандтля Pr указанных выше девяти газов, которые вместе со значениями отношения удельной теплоемкости при постоянном давлении c_p к газовой постоянной R даны в подробных таблицах в зависимости от температуры T для диапазона $100 \le T \le 3300$ K. Об относительной точности значений числа Pr сделаны следующие утверждения: примерно ±1.5% для интервала 300–500 K и до ±3% для более низких и высоких температур, за исключением O_2, NO (для этих газов даны оценки ±3% и ±5% соответственно). В [5] дан подробный обзор истории и теории вопроса.

Модифицированной поправкой Эйкена называется величина $\rho D c_{vi}$, входящая в выражение для коэффициента теплопроводности [1]

$$\lambda = \lambda_t + \rho D c_{vi} \tag{1}$$

Здесь λ_t – коэффициент теплопроводности одноатомного газа (т.е. рассчитываемый без учета внутренних степеней свободы молекул), который выражается через коэффициент динамической вязкости одноатомного газа η формулой

$$\lambda_t = \frac{15}{4}\eta R, \quad R = \frac{k}{m} \tag{2}$$

При помощи второго слагаемого формулы (1), т.е. модифицированной поправки Эйкена, производится простейший учет влияния внутренних степеней свободы молекул на теплопроводность: принимается во внимание только диффузионный перенос их внутренней энергии [1]. В формулах (1), (2) k – постоянная Больцмана, m – масса молекулы, ρ – массовая плотность, D – коэффициент самодиффузии одноатомного газа. Обусловленная внутренними степенями свободы молекул удельная теплоемкость при постоянном объеме

$$c_{vi} = c_p - \frac{5}{2}R \tag{3}$$

Отметим, что формулы (1), (2) получены в рамках главного приближения по полиномам Сонина [1].

С учетом формул (1)–(3) имеем выражение для числа Прандтля

$$\mathrm{Pr} \equiv \frac{c_p\eta}{\lambda} = \frac{c_p}{R}\left[\frac{15}{4} + \beta\left(\frac{c_p}{R} - \frac{5}{2}\right)\right]^{-1} \tag{4}$$

Согласно кинетической теории

$$\beta \equiv \frac{\rho D}{\eta} = \frac{6}{5}A^*, \quad A^* = \frac{\Omega_{22}^*}{\Omega_{11}^*} \tag{5}$$

Здесь Ω_{11}^*, Ω_{22}^* – приведенные интегралы столкновений [1], их величина определяется видом межмолекулярного потенциала. Для них (и, следовательно, для параметра β) обычно применяются аппроксимационные соотношения. Простейшим и часто используемым для оценок является выражение [1]

$$\beta \equiv \beta^{(1)} = 1.328 \tag{6}$$

Зависимость β от T дается аппроксимацией (см. формулы (11.9) и (11.10) в [5])

$$\beta \equiv \beta^{(2)} = \frac{6}{5}A^*$$
$$A^* = \exp[0.1281 - 0.1108\ln T^* + 0.0962(\ln T^*)^2 - 0.027(\ln T^*)^3 + 0.0024(\ln T^*)^4], \tag{7}$$
$$1 \le T^* \le 25$$

Здесь безразмерная температура $T^* = T/(\varepsilon/k)$. Значения величины ε/k равны 98.4, 121.1, 125.0, 98.4, 245.3, 266.8, 161.4, 156.5, 207.7 [2, 5] соответственно для N_2, O_2, NO, CO, CO_2, N_2O, CH_4, CF_4, SF_6.

Для молекулярных газов рекомендованы [2, 5] более сложные выражения Ω_{11}^*, Ω_{22}^*. Эти выражения имеют весьма громоздкий вид и здесь не приводятся, тем более что они приведены не только в [5], но и в более доступной статье [2] (см. формулы (C.1)–(C.3b) из [2]; в первом слагаемом выражения для a_3 описка: оно должно быть равным 101.571, т.е в 100 раз больше).

Обозначим через $\beta^{(3)}$ величину параметра β, рассчитанную при помощи этих формул. Для анализа точности модифицированной поправки Эйкена введем величину

$$\Delta^{(n)} = \frac{\mathrm{Pr}^{(n)} - \mathrm{Pr}}{\mathrm{Pr}} \cdot 100, \quad n = 1, 2, 3 \tag{8}$$

Таблица 1

T, K	N_2			O_2			NO			CO		
	$\Delta^{(1)}$	$\Delta^{(2)}$	$\Delta^{(3)}$	$\Delta^{(1)}$	$\Delta^{(2)}$	$\Delta^{(3)}$	$\Delta^{(1)}$	$\Delta^{(2)}$	$\Delta^{(3)}$	$\Delta^{(1)}$	$\Delta^{(2)}$	$\Delta^{(3)}$
100	–14.8	–15.3	–16.3	–9.5	–9.8	–11.0				–19.0	–19.5	–20.4
150	–10.3	–10.2	–11.4	–7.0	–6.7	–8.0	–14.0	–14.0	–16.0	–13.9	–13.8	–15.0
200	–7.7	–7.4	–8.5	–5.1	–4.8	–5.9	–12.0	–11.0	–13.0	–10.9	–10.6	–11.7
250	–5.8	–5.6	–6.4	–4.4	–4.1	–5.1	–9.5	–9.2	–10.0	–8.8	–8.5	–9.6
273	–5.2	–4.9	–5.7	–3.9	–3.6	–4.5	–8.8	–8.5	–9.6	–8.1	–7.8	–8.7
293	–4.5	–4.2	–5.0	–3.7	–3.3	–4.3	–8.3	–8.0	–8.9	–7.6	–7.3	–8.0
313	–4.2	–3.9	–4.6	–3.4	–3.0	–4.0	–7.7	–7.4	–8.4	–7.0	–6.8	–7.5
333	–3.7	–3.5	–4.1	–3.0	–2.6	–3.5	–7.3	–6.9	–7.8	–6.5	–6.3	–6.1
353	–3.3	–3.1	–3.7	–2.5	–2.2	–3.0	–6.8	–6.5	–7.3	–6.1	–5.9	–5.7
373	–2.9	–2.8	–3.3	–2.1	–1.8	–2.6	–6.4	–6.1	–6.9	–5.7	–5.5	–5.3
423	–2.1	–2.0	–2.4	–1.3	–1.0	–1.7	–5.4	–5.2	–5.8	–4.8	–4.7	–4.4
473	–1.3	–1.3	–1.6	–0.5	–0.4	–0.9	–4.6	–4.4	–5.0	–3.9	–3.9	–3.7
523	–0.7	–0.8	–0.9	0.0	0.2	–0.3	–3.9	–3.8	–4.2	–3.2	–3.3	–3.1
573	–0.1	–0.3	–0.4	0.6	0.6	0.3	–3.3	–3.2	–3.5	–2.6	–2.8	–2.5
623	0.4	0.2	0.1	0.9	0.9	0.6	–2.7	–2.7	–3.0	–2.0	–2.3	–2.0
673	0.7	0.4	0.5	1.0	0.8	0.6	–2.2	–2.3	–2.5	–1.6	–1.9	–1.6
723	0.8	0.4	0.5	1.0	0.8	0.7	–1.7	–1.9	–2.0	–1.1	–1.5	–1.2
773	0.8	0.4	0.5	1.0	0.7	0.7	–1.3	–1.6	–1.6	–0.7	–1.1	–0.8
873	1.0	0.4	0.6	1.1	0.6	0.7	–0.6	–1.0	–0.9	0.0	–0.5	–0.2
973	1.0	0.4	0.6	1.1	0.6	0.7	0.0	–0.5	–0.3	0.7	0.0	0.3
1070	1.1	0.4	0.6	1.2	0.5	0.7	0.6	0.0	0.1	1.1	0.3	0.6
1170	1.2	0.4	0.6	1.3	0.5	0.8	1.0	0.2	0.5	1.2	0.3	0.7
1270	1.3	0.5	0.7	1.3	0.5	0.8	1.0	0.3	0.5	1.3	0.4	0.7
1770	1.7	0.7	0.7	2.0	1.0	0.8	1.8	0.8	0.6	1.6	0.6	0.9
2270	1.9	0.9	0.7	2.7	1.6	0.9	2.7	1.6	0.7	1.9	0.9	1.2
2770	2.1	1.2	0.8	3.2	2.1	0.9	3.4	2.3	0.8	2.1	1.2	1.5
3270	2.3	1.4	0.8	3.7	2.5	0.9	3.9	2.9	0.8	2.3	1.5	1.8

Здесь Pr – эталонное значение числа Прандтля, приведенное (вместе с c_p/R) в таблицах [2], $\mathrm{Pr}^{(n)}$ – его приближенное значение (4) с использованием параметров $\beta^{(n)}$ (т.е при вычислении $\mathrm{Pr}^{(1)}$ применяется формула (6) и т.д.). Модуль величины $\Delta^{(n)}$ дает относительное значение отклонения приближенного значения от точного в процентах.

В таблицах [2] низкие значения T представлены в градусах Кельвина K, высокие – в °C. В приведенных здесь табл. 1–3 применена единая шкала, значения T в K даются с учетом первых трех значащих цифр. Для $\Delta^{(n)}$ учитываются только десятые доли процента, этого достаточно для поставленной цели. Представленные на фиг. 1, 2 данные иллюстрируют погрешности поправки при невысоких температурах. Значе-

Таблица 2

T, K	N_2O			CO_2		
	$\Delta^{(1)}$	$\Delta^{(2)}$	$\Delta^{(3)}$	$\Delta^{(1)}$	$\Delta^{(2)}$	$\Delta^{(3)}$
250				–9.9	–10.7	–12.2
273	–7.6	–8.5	–10.2	–8.7	–9.2	–10.9
293	–6.8	–7.4	–9.3	–7.8	–8.2	–10.0
313	–6.0	–6.5	–8.5	–7.0	–7.2	–9.2
333	–5.4	–5.7	–7.9	–6.4	–6.4	–8.5
353	–4.9	–5.0	–7.3	–5.8	–5.7	–7.8
373	–4.5	–4.4	–6.7	–5.3	–5.1	–7.3
423	–3.5	–3.2	–5.6	–4.3	–3.9	–6.1
473	–2.8	–2.3	–4.7	–3.5	–2.9	–5.2
523	–2.3	–1.6	–4.0	–2.9	–2.3	–4.4
573	–1.8	–1.1	–3.4	–2.4	–1.7	–3.8
623	–1.5	–0.7	–2.9	–2.0	–1.3	–3.3
673	–1.1	0.4	–2.5	–1.6	–1.0	–2.8
723	–0.9	–0.2	–2.1	–1.4	–0.8	–2.4
773	–0.6	0.0	–1.8	–1.1	–0.5	–2.1
873	–0.2	0.3	–1.2	–0.7	–0.2	–1.5
973	0.0	0.5	–0.7	–0.3	0.0	–1.0
1070	0.4	0.7	–0.4	0.0	0.2	–0.7
1170	0.6	0.8	0.0	0.3	0.3	–0.3
1270	0.9	0.9	0.2	0.5	0.4	–0.1
1770	1.0	0.4	0.4	1.0	0.3	0.4
2270	1.2	0.2	0.5	1.2	0.1	0.4
2770	1.4	0.0	0.5	1.5	0.1	0.5
3270	1.6	0.0	0.5	1.7	0.1	0.5

ния величин $\Delta^{(2)}$, $\Delta^{(3)}$ для остальных газов лежат внутри коридора, ограниченного сверху кривыми для CH_4 или O_2, снизу – кривыми для SF_6 или NO.

Из представленных в таблицах и фиг. 1, 2 данных следуют качественные выводы о точности рассматриваемой поправки, примерно одинаковые для всех газов за исключением CF_4, когда имеет место необычно резкий рост коэффициента λ при $T >$ > 1200 K.

Погрешности применения приближения Эйкена (1) характеризуются определенной формулой (8) величиной $\Delta^{(n)}$. Для рассматриваемых газов (кроме CF_4) они максимальны при низких температурах [1], где значения $|\Delta(n)|$ достигают 10–20%. С ростом T эти значения уменьшаются, точность приближения (1) увеличивается, становясь приемлемой для практических расчетов (с учетом отмеченных выше погрешностей использованных здесь данных [2]). Значения величин $\Delta^{(n)}$ зависят от сорта газа. Точность приближения (1) зависит и от вида аппроксимации функции $\beta(T)$. При высоких T предпочтительнее применение параметра $\beta^{(3)}$, при низких – $\beta^{(2)}$.

Таблица 3

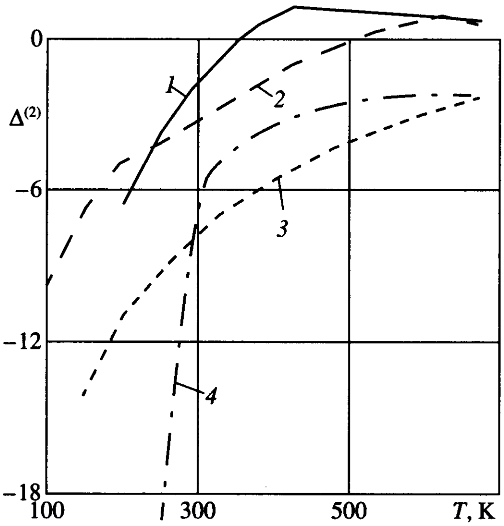
T, K	CF_4			CH_4			SF_6		
	$\Delta^{(1)}$	$\Delta^{(2)}$	$\Delta^{(3)}$	$\Delta^{(1)}$	$\Delta^{(2)}$	$\Delta^{(3)}$	$\Delta^{(1)}$	$\Delta^{(2)}$	$\Delta^{(3)}$
200	–11.1	–11.3	–13.7	–6.4	–6.6	–8.3			
250	–7.8	–7.4	–10.2	–4.0	–3.7	–5.6	–19.1	–19.6	–22.5
273	–6.8	–6.2	–9.0	–3.0	–2.7	–4.5	–11.8	–12.0	–15.3
293	–6.0	–5.3	–8.1	–2.3	–1.9	–3.7	–8.1	–8.0	–11.6
313	–5.4	–4.7	–7.4	–1.7	–1.2	–3.0	–5.7	–5.4	–9.0
333	–4.9	–4.1	–6.8	–1.1	–0.6	–2.4	–5.3	–4.8	–8.5
353	–4.5	–3.6	–6.2	–0.5	0.0	–1.8	–4.9	–4.2	–8.0
373	–4.1	–3.2	–5.8	–0.1	0.5	–1.3	–4.6	–3.8	–7.5
423	–3.3	–2.5	–4.8	0.7	1.3	–0.4	–4.1	–3.1	–6.6
473	–2.8	–2.0	–4.1	–0.6	1.2	–0.4	–3.7	–2.7	–6.0
523	–2.4	–1.7	–3.5	–0.6	1.1	–0.3	–3.5	–2.4	–5.4
573	–2.0	–1.5	–3.0	–0.5	1.0	–0.3	–3.3	–2.3	–5.0
623	–1.7	–1.6	–2.6	–0.5	0.9	–0.3	–3.1	–2.2	–4.7
673	–1.5	–1.3	–2.3	–0.5	0.7	–0.2	–3.0	–2.2	–4.4
723	–1.3	–1.2	–2.0	–0.5	0.6	–0.2	–2.9	–2.2	–4.1
773	–1.0	–1.1	–1.8	–0.5	0.5	–0.2	–2.8	–2.2	–4.0
873	–0.7	–1.0	–1.4	–0.5	0.2	–0.2	–2.6	–2.3	–3.6
973	–0.4	-.9	–1.1	–0.5	0.0	–0.1	–2.4	–2.3	–3.3
1070	0.0	–0.8	–0.8	–0.5	–0.1	–0.1	–2.2	–2.4	–3.0
1170	0.2	–0.7	–0.5	0.6	–0.2	–0.1	–2.1	–2.5	–2.8
1270	0.5	–0.6	–0.3	0.7	–0.3	–0.1	–1.9	–2.5	–2.6
1770	1.8	0.1	0.5	1.1	–0.5	–0.1	–1.1	–2.4	–2.0
2270	10.9	8.8	8.7	1.8	–0.1	0.0	–0.3	–2.1	–1.6
2770	24.6	22.0	21.2	2.5	0.5	0.0	0.4	–1.6	–1.3
3270	39.9	37.1	35.4	3.1	1.1	0.0	1.0	–1.2	–1.0

В целом можно рекомендовать приближение (7) для β (т.е. $\beta^{(2)}$) для тех значений T, где величина $\Delta^{(2)}$ попадает в коридор разброса данных [2]. Аппроксимация (7) дает существенно более точные результаты, чем аппроксимация (6), формула (7) кардинально проще формул [2, 5] для $\beta^{(3)}$.

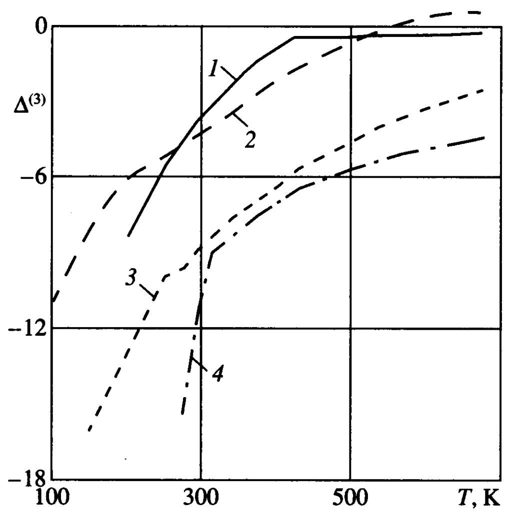
Необходимо дальнейшее накопление базы данных по теплопроводности, особенно для полярных газов [3, 5].

Заключение. Приведенные результаты конкретизируют и уточняют известные общие представления о применимости модифицированной поправки Эйкена.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (№ 02-01-00501) и программ "Государственная поддержка ведущих научных школ" (НШ-1984.2003.1) и Министерства образования РФ (Е02-40-52).



Фиг. 1. Зависимость относительной погрешности $\Delta^{(2)}$ от температуры T: 1 – CH_4, 2 – O_2, 3 – NO, 4 – SF_6



Фиг. 2. Зависимость относительной погрешности $\Delta^{(3)}$ от T, обозначения те же, что на фиг. 1

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Ferziger J.H., Kaper H.G.* Mathematical Theory of Transport Processes in Gases. Amsterdam; London: North-Holland, 1972. = *Ферцигер Дж., Капер Г.* Математическая теория процессов переноса в газах. М.: Мир, 1976. 554 с.
2. *Uribe F.J., Mason E.A., Kestin J.* Thermal conductivity of nine polyatomic gases at low density // J. Phys. Chem. Ref. Data.1990. V. 19. № 5. P. 1123–1136.
3. *Ковалев В.Л.* Гетерогенные каталитические процессы в аэротермодинамике. М.: Физматлит, 2002. 224 с.
4. *Reid R.C., Prausnitz J.M., Shervwood T.K.* The properties of gases and liquids. N. Y.: McGraw-Hill, 1966. = *Рид Р., Праусниц Дж., Шервуд Т.* Свойства газов и жидкостей. Л.: Химия, 1982. 591 с.
5. *Mason E.A., Uribe F.J.* The corresponding-states principle: dilute gases // Transport Properties of Fluids. Their Correlation, Prediction and Estimation. Cambridge: Univ. Press, 1996. P. 250–282.

Москва

Поступила в редакцию
21.XII.2004