

**ПРОЦЕССЫ ТЕПЛО- И МАССОПЕРЕНОСА
МНОГОАТОМНОГО ГАЗА В ПЛОСКОМ КАНАЛЕ
ПРИ ПРОИЗВОЛЬНЫХ ЧИСЛАХ КНУДСЕНА**

*И. В. Чермянинов, В. Г. Черняк, Г. А. Фомягин
(Свердловск)*

Движение многоатомного газа в плоском канале под действием градиентов давления и температуры изучалось в [1]. Решение задачи получено численным методом на основе модельного уравнения Хансона — Морзе с учетом возбуждения лишь одного вида внутренней энергии. Сделанный в [1] вывод о независимости эффекта тепловой транспирации от внутренних степеней свободы молекул противоречит существующим представлениям. До сих пор считалось, что такая зависимость существует. Более того, она полагалась в основу экспериментального определения вращательных столкновительных чисел [2]. В связи с этим результаты [1] требуют дополнительной проверки.

В данной работе процессы тепло- и массопереноса многоатомного газа в плоском канале описываются на основе модельного уравнения [3], которое в отличие от уравнения Хансона — Морзе, использованного в [1], учитывает возможность возбуждения двух видов внутренней энергии молекул, например вращательной и колебательной. Метод решения системы интегрально-моментных уравнений позволяет получить достаточно точные результаты во всем диапазоне чисел Кнудсена Kn и, кроме того, приводит к простым аналитическим выражениям для потоков в двух предельных случаях: $Kn \ll 1$ и $Kn \gg 1$. Это позволяет наглядно проанализировать вклад внутренних степеней свободы молекул при различных числах Kn в тепловой крип и в различные составляющие тепловых потоков, обусловленных градиентами давления и температуры.

Рассмотрим движение многоатомного однокомпонентного газа между бесконечными параллельными пластинами $x = \pm d/2$, обусловленное продольными (вдоль оси z) градиентами давления и температуры. При этом в газе возбуждены вращательные и колебательные степени свободы молекул. Принимается, что поступательная, вращательная и колебательная температуры молекул в каждом сечении канала равны между собой и равны температуре T . Состояние газа предполагается слабо возмущенным, и функция распределения для молекул, находящихся в i -м вращательном и j -м колебательном состояниях, записывается в виде малого отклонения от распределения Максвелла — Больцмана:

$$(1) \quad f_{ij} = P_i^{(r)} P_j^{(v)} f_0(z) [1 + h_{ij}(x, v)], \quad |h_{ij}| \ll 1$$

$$f_0(z) = n(z) \left[\frac{m}{2\pi kT(z)} \right]^{3/2} \exp \left[-\frac{mv^2}{2kT(z)} \right], \quad P_\beta^{(\alpha)} =$$

$$= \frac{\exp \left[-E_\beta^{(\alpha)} / kT(z) \right]}{\sum_\beta \exp \left[-E_\beta^{(\alpha)} / kT(z) \right]}, \quad \alpha = r, v, \quad \beta = i, j,$$

где n — числовая плотность газа; m — масса молекулы; $P_\beta^{(\alpha)}$ — вероятность состояния с энергией $E_\beta^{(\alpha)}$; k — постоянная Больцмана.

Поскольку межмолекулярные столкновения, сопровождающиеся переходами как по вращательному, так и по колебательному спектру одновременно очень редки [4], то будем пренебрегать ими.

Тогда с учетом выражения (1) модельное кинетическое уравнение [3] для функции возмущения h_{ij} записывается в следующем безразмерном виде:

$$(2) \quad c_x \frac{\partial h_{ij}}{\partial y} + c_z v + c_z \left(c^2 - \frac{5}{2} + \varepsilon_i^{(r)} - \langle \varepsilon^{(r)} \rangle + \varepsilon_j^{(v)} - \langle \varepsilon^{(v)} \rangle \right) \tau = \\ = \delta \left[2uc_z + \frac{4}{5} c_z \left(c^2 - \frac{5}{2} \right) (\varphi_1 Q^{(t)} + \varphi_2 Q^{(r)} + \varphi_3 Q^{(v)}) + \right. \\ \left. + \frac{2k}{c_V^r} c_z (\varepsilon_i^{(r)} - \langle \varepsilon^{(r)} \rangle) (\varphi_4 Q^{(r)} + \varphi_5 Q^{(t)}) + \right. \\ \left. + \frac{2k}{c_V^v} c_z (\varepsilon_j^{(v)} - \langle \varepsilon^{(v)} \rangle) (\varphi_6 Q^{(v)} + \varphi_7 Q^{(t)}) - h_{ij} \right],$$

где

$$y = \frac{x}{d}, \quad v = \frac{d}{p} \frac{dp}{dz}, \quad \tau = \frac{d}{T} \frac{dT}{dz}, \quad \delta = \frac{1}{\tau_\eta} \left(\frac{m}{2kT_0} \right)^{1/2} d,$$

$$c_i = \left(\frac{m}{2kT_0} \right)^{1/2} \dot{v}_i, \quad \varepsilon_i^{(r)} = \frac{\bar{E}_i^{(r)}}{kT_0}, \quad \langle \varepsilon^{(r)} \rangle = \frac{E_0^{(r)}}{kT_0},$$

$$\varphi_1 = \frac{1}{3} - \frac{5}{9} \left(\frac{c_V^r}{k} \alpha + \frac{c_V^v}{k} \alpha' \right), \quad \varphi_2 = \frac{5}{6} \alpha, \quad \varphi_3 = \frac{5}{6} \alpha',$$

$$\varphi_4 = 1 - \frac{\alpha}{2} - \frac{1}{\beta}, \quad \varphi_5 = \frac{1}{3} \frac{c_V^r}{k} \alpha, \quad \varphi_6 = 1 - \frac{\alpha'}{2} - \frac{1}{\beta'}, \quad \varphi_7 = \frac{1}{3} \frac{c_V^v}{k} \alpha',$$

$$\alpha = \frac{\tau_\eta}{\tau_{rr}}, \quad \alpha' = \frac{\tau_\eta}{\tau_{vv}}, \quad \beta = \frac{\tau_{Drr}}{\tau_\eta}, \quad \beta' = \frac{\tau_{Dvv}}{\tau_\eta}, \quad \tau_\eta = \frac{\eta}{p};$$

$$(3) \quad u = \left(\frac{m}{2kT_0} \right)^{1/2} U = \pi^{-3/2} \sum_{ij} P_i P_j \int \exp(-c^2) c_z h_{ij} dc,$$

$$Q^{(t)} = \left(\frac{m}{2kT_0} \right)^{1/2} \frac{q^{(t)}}{p_0} = \pi^{-3/2} \sum_{ij} P_i P_j \int \exp(-c^2) c_z \left(c^2 - \frac{5}{2} \right) h_{ij} dc,$$

$$Q^{(\alpha)} = \left(\frac{m}{2kT_0} \right)^{1/2} \frac{q^{(\alpha)}}{p_0} = \pi^{-3/2} \sum_{ij} P_i P_j \int \exp(-c^2) c_z (\varepsilon_\beta^{(\alpha)} - \langle \varepsilon^{(\alpha)} \rangle) h_{ij} dc,$$

$$c_V^{(\alpha)} = k (\langle \varepsilon_\beta^{(\alpha)2} \rangle - \langle \varepsilon_\beta^{(\alpha)} \rangle^2), \quad \alpha = r, v; \quad \beta = i, j.$$

Здесь U — макроскопическая скорость газа; $q^{(t)}$, $q^{(r)}$, $q^{(v)}$ — составляющие плотности теплового потока, обусловленные соответственно поступательными, вращательными и колебательными степенями свободы молекул; p и η — соответственно давление и коэффициент динамической вязкости газа; T_0 — средняя температура газа; c_V^r , c_V^v — вклады внутренних степеней свободы молекул в теплоемкость при постоянном объеме; угловые скобки обозначают усреднение по внутренним состояниям молекул. Времена релаксации τ_η , τ_{rr} , τ_{vv} , τ_{Drr} , τ_{Dvv} при заданном потенциале межмолекулярного взаимодействия могут быть вычислены [4] или взяты из экспериментов [5].

Если среднюю длину свободного пробега молекул определить в виде [4] $l = \frac{\pi}{4} \tau_\eta \left(\frac{8kT_0}{\pi m} \right)^{1/2}$, то параметр разреженности газа δ связан с числом Кнудсена соотношением $\delta = (\sqrt{\pi}/2) \text{Kn}^{-1}$.

В качестве граничного условия предполагается полностью диффузное рассеяние молекул на ограничивающих газ пластинах. Тогда для функции возмущения имеем

$$(4) \quad h_{ij}(y = -(1/2) \text{sign } c_x, c) = 0.$$

Линеаризация задачи позволяет представить решение уравнения (2) в виде [1]

$$(5) \quad h_{ij} = h_{ij}^p v + h_{ij}^T \tau.$$

Подстановка выражения (5) в уравнения (2)—(4) и приравнивание членов при каждом из градиентов приводят к расщеплению общей задачи на две: первая содержит уравнения, описывающие процессы тепло- и массопереноса под действием градиента давления, а вторая — под действием градиента температуры.

Записывая уравнение (2) в интегральной форме с учетом граничных условий (4) и подставляя полученное выражение для функции возмущения в соотношения (3), нетрудно получить две системы интегрально-моментных уравнений для макроскопических скоростей u_p , u_T и поступательной, вращательной и колебательной составляющих тепловых потоков $Q_p^{(l)}$, $Q_T^{(l)}$ ($l = t, r, v$), обусловленных соответственно градиентами давления и температуры:

(6)

$$u_{p,T} = \frac{\delta}{\sqrt{\pi}} \int_{-1/2}^{+1/2} \left[u_{p,T} J_{-1} + \frac{2}{5} (\varphi_1 Q_{p,T}^{(t)} + \varphi_2 Q_{p,T}^{(r)} + \varphi_3 Q_{p,T}^{(v)}) \left(J_1 - \frac{1}{2} J_{-1} \right) \right] dy' + K_{p,T}^{(1)};$$

(7)

$$Q_{p,T}^{(t)} = \frac{\delta}{\sqrt{\pi}} \int_{-1/2}^{+1/2} \left[u_{p,T} \left(J_1 - \frac{1}{2} J_{-1} \right) + \frac{2}{5} (\varphi_1 Q_{p,T}^{(t)} + \varphi_2 Q_{p,T}^{(r)} + \varphi_3 Q_{p,T}^{(v)}) \left(J_3 - J_1 + \frac{9}{4} J_{-1} \right) \right] dy' + K_{p,T}^{(2)};$$

(8)

$$Q_{p,T}^{(r)} = \frac{\delta}{\sqrt{\pi}} \int_{-1/2}^{+1/2} (\varphi_4 Q_{p,T}^{(v)} + \varphi_5 Q_{p,T}^{(t)}) J_{-1} dy' + K_{p,T}^{(3)};$$

(9)

$$Q_{p,T}^{(v)} = \frac{\delta}{\sqrt{\pi}} \int_{-1/2}^{+1/2} (\varphi_6 Q_{p,T}^{(v)} + \varphi_7 Q_{p,T}^{(t)}) J_{-1} dy' + K_{p,T}^{(4)};$$

где

$$K_p^{(1)} = -\frac{1}{2\sqrt{\pi}} \int_{-1/2}^{+1/2} J_{-1} dy', \quad K_T^{(1)} = K_p^{(2)} = -\frac{1}{2\sqrt{\pi}} \int_{-1/2}^{+1/2} \left(J_1 - \frac{1}{2} J_{-1} \right) dy';$$

$$K_T^{(2)} = -\frac{1}{2\sqrt{\pi}} \int_{-1/2}^{+1/2} \left(J_3 - J_1 + \frac{9}{4} J_{-1} \right) dy', \quad K_p^{(3)} = K_p^{(4)} = 0,$$

$$K_T^{(3)} = \frac{c^r}{k} K_p^{(1)}, \quad K_T^{(4)} = \frac{c^v}{k} K_p^{(1)}, \quad J_n(t) = \int_0^{\infty} c^n \exp\left(-c^2 - \frac{t}{c}\right) dc.$$

Аргументом функции J_n в уравнениях (6)—(9) является $(\delta|y - y'|)$. Уравнения (6)—(9) определяют локальные значения макроскопических величин. Практический интерес, однако, представляют числовой I_n и тепловой I_q потоки, осредненные по сечению канала:

$$(10) \quad I_n = n \int_{-1/2}^{+1/2} U dy = L_{nn} X_n + L_{nq} X_q,$$

$$I_q = \int_{-1/2}^{+1/2} q dy = \int_{-1/2}^{+1/2} (q^{(t)} + q^{(r)} + q^{(v)}) dy = L_{qn} X_n + L_{qq} X_q,$$

где термодинамические силы выбраны в виде [1]

$$(11) \quad X_n = -kv, \quad X_q = -\tau/T_0.$$

В соответствии с основными положениями термодинамики неравновесных процессов в прерывных системах [6] для перекрестных коэффициен-

тов во всем диапазоне чисел Кп должно выполняться соотношение взаимности $L_{nq} = L_{qn}$.

Для численных расчетов удобно воспользоваться безразмерными величинами, которые связаны с кинетическими коэффициентами следующими соотношениями:

$$(12) \quad G_p = \left(\frac{m}{2kT_0}\right)^{1/2} \frac{k}{n_0} L_{nn}, \quad G_T = -\left(\frac{m}{2kT_0}\right)^{1/2} \frac{k}{P_0} L_{nq},$$

$$S_p^{(l)} = -\left(\frac{m}{2kT_0}\right)^{1/2} \frac{k}{P_0} L_{qn}^{(l)}, \quad S_T^{(l)} = \left(\frac{m}{2kT_0}\right)^{1/2} \frac{1}{P_0 T_0} L_{qq}^{(l)}, \quad l = t, r, v,$$

$$L_{qn} = L_{qn}^{(t)} + L_{qn}^{(r)} + L_{qn}^{(v)}, \quad G_T = S_p^{(t)} + S_p^{(r)} + S_p^{(v)}.$$

Важными частными случаями являются эффект термомолекулярного давления и механокалорический эффект. Первый является стационарным состоянием, когда градиент температуры поддерживается постоянным и в системе устанавливается соответствующий градиент давления. Это состояние характеризуется отсутствием полного числового потока, осредненного по сечению канала, т. е. $I_n = 0$. Тогда из выражений (10), (11), (12) следует

$$(13) \quad \gamma = \frac{G_T}{G_p} = \frac{\nu}{\tau} = \frac{dp/p}{dT/T}.$$

Механокалорический эффект является стационарным состоянием второго порядка [6] и характеризует перенос тепла вдоль канала при постоянном градиенте давления в отсутствие градиента температуры ($\tau = 0$).

Из выражений (10), (12), (13) следует

$$(14) \quad I_q = \frac{L_{nq}}{L_{nn}} I_n = -\gamma k T_0 I_n.$$

Таким образом, универсальный показатель термомолекулярного давления γ определяет и величину механокалорического эффекта.

Для определения потоков (10) и показателя термомолекулярного давления (13) необходимо решить систему интегральных уравнений (6)–(9). Эти уравнения являются уравнениями фредгольмовского типа второго рода. Следовательно, для их решения можно воспользоваться методом Бубнова — Галеркина [7]. При этом важное значение имеет выбор вида пробных функций для макроскопических величин. Следует иметь в виду, что профили макроскопических величин в почти свободномолекулярном режиме точно описываются свободными членами интегральных уравнений (6)–(9). Поэтому для того, чтобы решение содержало другой предельный случай ($Kp \ll 1$), вид пробных функций следует выбирать, исходя из поведения макропараметров в почти континуальном режиме. Учитывая симметрию задачи, искомые функции $u_{pT}, Q_{pT}^{(l)}$ ($l = t, r, v$) могут быть представлены в виде неограниченного ряда по четным базовым функциям $\{y^{2k}\}$ ($k = 0, 1, \dots$). В частности, в первом приближении можно положить

$$(15) \quad u_k(y) \approx a_k + b_k y^2, \quad Q_k^{(l)}(y) \approx c_k^{(l)}, \quad k = p, T, \quad l = t, r, v.$$

Пробные функции (15) по виду соответствуют решениям уравнений Навье — Стокса и теплопроводности. Как показало решение аналогичной задачи для одноатомного газа [8], такое приближение вносит погрешность не более 1,5% во всем диапазоне чисел Кп, т. е. метод сходится очень быстро. По-видимому, такую же точность следует ожидать и в случае многоатомного газа.

Для определения постоянных $a_k, b_k, c_k^{(l)}$ пробные функции (15) необходимо подставить в систему уравнений (6)–(9) и потребовать ортогональность полученных выражений к выбранным базовым функциям, причем условие ортогональности для произвольных функций f и g имеет вид

$$(f, g) = \int_{-1/2}^{+1/2} f(y) g(y) dy = 0.$$

Таким образом, величины $a_k, b_k, c_k^{(l)}$ находятся из решения системы пяти линейных алгебраических уравнений. Определив их, можно получить выражения для потоков I_n, I_q и показателя термомолекулярного давления γ . Окончательные выражения имеют громоздкий вид и поэтому здесь не приводятся. Интерес представляют асимптотические разложения этих выражений для двух предельных случаев:

почти свободномолекулярный режим ($\delta \ll 1$)

$$(16) \quad G_p = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} (-\ln \delta + 0,6342 + 0,5908\delta), \quad G_T = \\ = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} (-0,5 \ln \delta - 0,1829 + 0,5908\delta), \\ S_p^{(t)} = G_T, \quad S_p^{(r)} = S_p^{(v)} = 0, \quad S_T^{(t)} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} (-2,25 \ln \delta + 1,4270 + \\ + 1,4770\delta), \\ S_T^{(r)} = \frac{c_V^r}{k} G_p, \quad S_T^{(v)} = \frac{c_V^v}{k} G_p;$$

почти континуальный режим ($\delta \gg 1$)

$$(17) \quad G_p = \frac{\delta}{12} + \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \left(\frac{\pi}{4} + 1 \right);$$

$$(18) \quad G_T = \frac{3}{20} \frac{m\lambda^i}{k\eta} \frac{1}{\delta} - \frac{3}{20\sqrt{\pi}} \frac{m\lambda^i}{k\eta} \left[\frac{\pi}{2} - \frac{8}{15} + \frac{9}{5} \frac{\left(1 + \frac{\alpha\beta}{2}\right) \left(1 + \frac{\alpha'\beta'}{2}\right)}{\Delta_0} + \right. \\ \left. + \frac{\frac{\alpha\beta}{3} \left(1 + \frac{\alpha'\beta'}{2}\right) \frac{m\lambda^r}{k\eta} + \frac{\alpha'\beta'}{3} \left(1 + \frac{\alpha\beta}{2}\right) \frac{m\lambda^v}{k\eta}}{\Delta_1} \right] \frac{1}{\delta^2} + \dots;$$

(19)

$$S_p^{(t)} = \frac{9}{16} \frac{\left(1 + \frac{\alpha\beta}{2}\right) \left(1 + \frac{\alpha'\beta'}{2}\right)}{\Delta_0} \frac{1}{\delta} - \frac{9}{16\sqrt{\pi}} \frac{\left(1 + \frac{\alpha\beta}{2}\right) \left(1 + \frac{\alpha'\beta'}{2}\right)}{\Delta_0} \left[\frac{\pi}{2} - \frac{8}{15} + \right. \\ \left. + \frac{9}{5} \frac{\left(1 + \frac{\alpha\beta}{2}\right) \left(1 + \frac{\alpha'\beta'}{2}\right)}{\Delta_0} + \frac{5}{12} \frac{c_V^r}{k} \frac{(\alpha\beta)^2 \left(1 + \frac{\alpha'\beta'}{2}\right)}{\Delta_0 \left(1 + \frac{\alpha\beta}{2}\right)} + \frac{5}{12} \frac{c_V^v}{k} \frac{(\alpha'\beta')^2 \left(1 + \frac{\alpha\beta}{2}\right)}{\Delta_0 \left(1 + \frac{\alpha'\beta'}{2}\right)} \right] \frac{1}{\delta^2} + \dots;$$

$$(20) \quad S_p^{(r)} = \frac{9}{16} \frac{c_V^r}{k} \frac{\alpha\beta}{3} \frac{\left(1 + \frac{\alpha'\beta'}{2}\right)}{\Delta_0} \frac{1}{\delta} - \frac{9}{16\sqrt{\pi}} \frac{c_V^r}{k} \frac{\alpha\beta}{3} \frac{\left(1 + \frac{\alpha'\beta'}{2}\right)}{\Delta_0} \left[\frac{\pi}{2} - \frac{8}{15} + \right. \\ \left. + \frac{\left[\frac{9}{5} \left(1 + \frac{\alpha\beta}{2}\right) + \beta \left(1 + \frac{5}{6} \frac{c_V^r}{k} \alpha + \frac{5}{6} \frac{c_V^v}{k} \alpha'\right) \right] \left(1 + \frac{\alpha'\beta'}{2}\right)}{\Delta_0} + \right. \\ \left. + \frac{5}{12} \frac{c_V^v}{k} (\alpha')^2 \beta' \left[\beta' \left(1 + \frac{\alpha\beta}{2}\right) - \beta \left(1 + \frac{\alpha'\beta'}{2}\right) \right] \right] \frac{1}{\delta^2} + \dots;$$

$$(21) \quad S_T^{(t)} = \frac{1}{2} \frac{m\lambda^t}{k\eta} \frac{1}{\delta} - \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \frac{m\lambda^t}{k\eta} \left[\frac{9}{5} \left(1 + \frac{\alpha\beta}{2}\right) \left(1 + \frac{\alpha'\beta'}{2}\right) + \frac{\alpha\beta}{3} \left(1 + \frac{\alpha'\beta'}{2}\right) \frac{m\lambda^r}{k\eta} + \frac{\alpha'\beta'}{3} \left(1 + \frac{\alpha\beta}{2}\right) \frac{m\lambda^v}{k\eta} \right] \frac{1}{\delta^2} + \dots;$$

$$(22) \quad S_T^{(r)} = \frac{1}{2} \frac{m\lambda^r}{k\eta} \frac{1}{\delta} - \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \frac{m\lambda^r}{k\eta} \left[\frac{\left(1 + \frac{5}{6} \frac{c_V^r}{k} \alpha\right) \left(1 + \frac{\alpha'\beta'}{2}\right) + \frac{5}{6} \frac{c_V^v}{k} \alpha'}{\Delta_0} \beta + \frac{\alpha \left[\frac{5}{12} \alpha'\beta' \frac{m\lambda^v}{k\eta} + \frac{3}{5} \left(1 + \frac{\alpha'\beta'}{2}\right) \frac{m\lambda^t}{k\eta} \right]}{\Delta_2} \right] \frac{1}{\delta^2} + \dots,$$

где

$$\Delta_0 = 1 + \frac{\alpha}{2} \left(\frac{5}{3} \frac{c_V^r}{k} + \beta \right) \left(1 + \frac{\alpha'\beta'}{2} \right) + \frac{\alpha'}{2} \left(\frac{5}{3} \frac{c_V^v}{k} + \beta' \right) \left(1 + \frac{\alpha\beta}{2} \right) - \frac{1}{4} \alpha\alpha'\beta\beta',$$

$$\Delta_1 = 1 + \frac{\alpha\beta}{2} \left(1 + \frac{2}{3} \frac{c_V^r}{k} \right) \left(1 + \frac{\alpha'\beta'}{2} \right) + \frac{\alpha'\beta'}{2} \left(1 + \frac{2}{3} \frac{c_V^v}{k} \right) \left(1 + \frac{\alpha\beta}{2} \right) - \frac{1}{4} \alpha\alpha'\beta\beta',$$

$$\Delta_2 = 1 + \frac{5}{4} \alpha \left(1 + \frac{2}{3} \frac{c_V^r}{k} \right) \left(1 + \frac{\alpha'\beta'}{2} \right) + \frac{5}{6} \frac{c_V^v}{k} \alpha' \left(1 + \frac{\alpha\beta}{2} \right) + \frac{\alpha'\beta'}{2}.$$

Асимптотические разложения для $S_p^{(v)}$ и $S_T^{(r)}$ получаются соответственно из выражений для $S_p^{(r)}$ и $S_T^{(r)}$ заменой индекса r на v и величин α на α' , β на β' ; λ^t , λ^r , λ^v — коэффициенты теплопроводности, обусловленные поступательными, вращательными и колебательными степенями свободы молекул [4].

В режиме, близком к свободномолекулярному, выражения (16) для потоков G_p , G_T , $S_p^{(t)}$, $S_T^{(t)}$ соответствуют случаю одноатомного газа. Внутренние составляющие $S_p^{(r)}$, $S_p^{(v)}$ теплового потока, вызванного градиентом давления, в этом режиме равны нулю, так как отсутствует единственный обуславливающий их фактор: неупругие столкновения между молекулами.

Выражения (17)–(22), полученные, за исключением (17), впервые, описывают процессы тепло- и массопереноса многоатомного газа в плоском канале при $\delta \gg 1$, когда существенную роль играют столкновения между молекулами. Если колебательные степени свободы молекул не возбуждены, то первые члены для G_p , G_T и S_T совпадают с приведенными в [1].

Однако сделанный в [1] вывод о том, что эффект тепловой транспирации зависит лишь от поступательного фактора Эйкена, неверен. Из выражения (18) следует, что второе слагаемое ($\sim \delta^{-2}$) включает также и внутренние составляющие полного фактора Эйкена.

Численные расчеты макроскопических величин проводились с точностью не менее 0,1% при любых значениях параметра разреженности δ ($0,01 \leq \delta \leq 40$). Значения параметров α , α' , β , β' выбирались из экспериментов. Величина α изменялась от 0 (замедленный обмен энергией между поступательными и вращательными степенями свободы молекул, $\tau_\eta \ll \tau_{rr}$) до 1,2 (легкий обмен энергией, $\tau_\eta \sim \tau_{rr}$) [4]. Поскольку в масштабе среднего свободного пробега молекул колебательная релаксация — очень медленный процесс (колебательные столкновительные числа имеют порядок $10^3 - 10^7$ [9]), параметр α' выбирался в интервале [0; 0,001]. Значения для $\beta = \rho D_{rr}/\eta$ и $\beta' = \rho D_{vv}/\eta$ ($\rho = mn$; D_{rr} , D_{vv} — соответственно коэффициенты диффузии вращательно и колебательно-возбужденных молекул среди невозбужденных) выбирались равными $\beta \approx \beta' \approx 1,32$, что справедливо в широком интервале температур для неполярных молекул [4, 9, 10].

Сравнение результатов данной работы с численным решением [1] показало, что если колебательные степени свободы молекул не возбуждены, то при одинаковом выборе исходных параметров максимальное расхождение для G_p достигает 0,4% при $\delta = 40$, для G_T — 2,8% при $\delta = 40$, для S_T — 0,4% при $\delta = 5$. Таким образом, как и в случае одноатомного газа [8], метод Бубнова — Галеркина сходится достаточно быстро. При необходимости для уточнения полученных результатов следует усложнить вид пробных функций (15).

Представляет интерес рассмотреть механизм и сделать численные оценки вклада внутренних степеней свободы молекул в потоки. При отсутствии неупругих столкновений, когда $\alpha = \alpha' = 0$ (приближение Эйкена), тепловой крип G_T , трансляционные составляющие тепловых потоков $S_p^{(t)}, S_T^{(t)}$ ничем не отличаются от результатов для одноатомного газа [8], а внутренние составляющие теплового потока, вызванного градиентом давления, равны нулю. Следовательно, внутренние степени свободы молекул дают вклад в эти потоки лишь при наличии неупругих столкновений.

По-другому ведут себя внутренние составляющие $S_T^{(r)}, S_T^{(v)}$ теплового потока, вызванного градиентом температуры. Эти потоки обусловлены как неупругими столкновениями между молекулами, так и диффузионным переносом соответственно вращательно- и колебательно-возбужденных молекул.

Приведем численные оценки вклада внутренних степеней свободы молекул при различных значениях параметра разреженности δ . Расчет показал, что колебательные степени свободы дают очень малый (по сравнению с вращательными степенями свободы) вклад во все потоки, за исключением $S_T^{(v)}$.

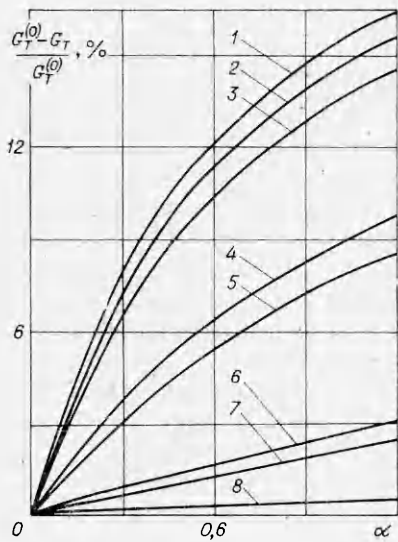
Пуазейлевский поток очень слабо зависит от внутренних степеней свободы молекул: наибольший вклад их составил 1,2% при $\delta \approx 1$, $\alpha = 1,2$ для двухатомного газа с вращательными степенями свободы ($c_V^r/k = 1$). При этом пуазейлевский поток уменьшается.

На фиг. 1 показан относительный вклад вращательных степеней свободы двухатомных молекул в тепловой крип G_T при различных δ (кривая 1 — $\delta = 30$; 2 — $\delta = 10$; 3 — $\delta = 5$; 4 — $\delta = 1$; 5 — $\delta = 0,7$; 6 — $\delta = 0,1$; 7 — $\delta = 0,07$; 8 — $\delta = 0,01$). Тепловой крип с ростом δ уменьшается и в гидродинамическом пределе равен нулю. При этом относительный вклад внутренних степеней свободы с ростом δ увеличивается. Так, в вязком со скольжением режиме ($\delta = 30$) уменьшение величины G_T по сравнению с результатом для одноатомного газа $G_T^{(0)}$ достигает 16,5% при увеличении α от 0 до 1,2. Уменьшение величины теплового крипа объясняется переходом части поступательной энергии молекул во внутреннюю при неупругих столкновениях.

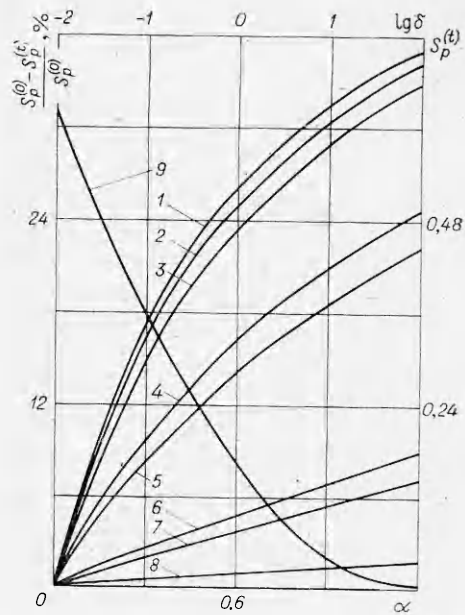
Полученный результат противоречит выводу работы [1] о том, что эффект тепловой транспирации (13) не зависит от внутренних степеней свободы молекул. Ошибочный вывод [1], несмотря на то что все численные процедуры сделаны правильно, является следствием неверного выбора исходных варьируемых параметров.

В качестве таковых в [1] использовались полный фактор Эйкена и его поступательная составляющая. Однако известно [2, 4], что каждый из этих параметров является функцией характерных времен релаксаций, т. е. зависит от α и β .

На фиг. 2, 3 представлена зависимость поступательной $S_p^{(t)}$, вращательной $S_p^{(r)}$ и колебательной $S_p^{(v)}$ составляющих теплового потока, обусловленного градиентом давления, от параметра разреженности δ и величины α для двухатомного газа с $c_V^r/k = c_V^v/k = 1$, $\alpha' = 0,001$ (на фиг. 2 кривая 1 — $\delta = 30$; 2 — $\delta = 10$; 3 — $\delta = 5$; 4 — $\delta = 1$; 5 — $\delta = 0,7$; 6 — $\delta = 0,1$; 7 — $\delta = 0,07$; 8 — $\delta = 0,01$. Кривая 9 описывает изменение $S_p^{(t)}$ при $\alpha = 0,3$ от величины δ). На фиг. 3 сплошные кривые отно-



Фиг. 1

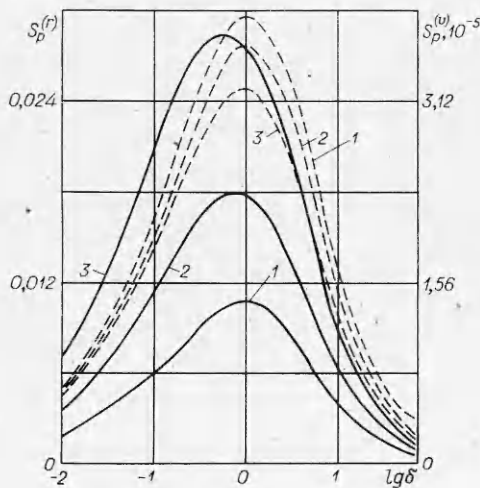


Фиг. 2

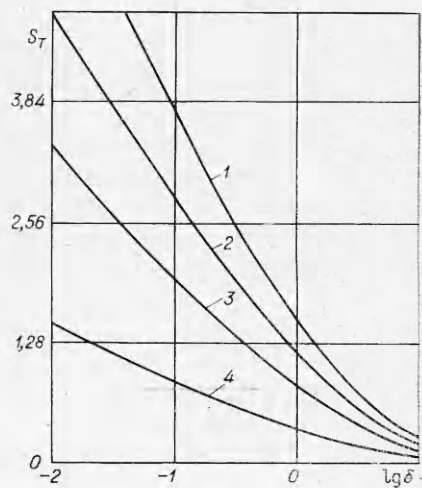
сятся к величине $S_p^{(r)}$, штриховые — к $S_p^{(v)}$ (кривые 1 — $\alpha = 0,3$; 2 — $\alpha = 0,6$; 3 — $\alpha = 1,2$).

Вклад внутренних степеней свободы в $S_p^{(r)}$ довольно большой (см. фиг. 2). При $\delta = 10$ уменьшение поступательной составляющей теплового потока по сравнению с результатом для одноатомного газа $S_p^{(0)}$ достигает 34% при $\alpha = 1,2$.

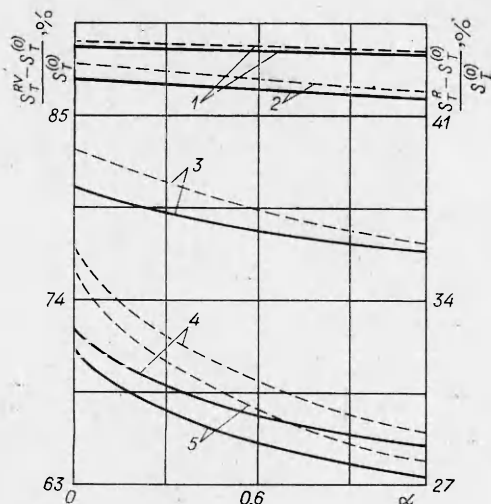
Наличие тепловых потоков $S_p^{(t)}, S_p^{(r)}, S_p^{(v)}$ есть чисто кинетическое явление, имеющее место лишь в разреженном газе. В пределе сплошной среды они отсутствуют, и на фиг. 2, 3 видно их стремление к нулю. Что касается предела, близкого к свободномолекулярному (16), то перенос тепла осуществляется лишь посредством поступательного движения молекул. Это значит, что в промежуточном режиме потоки $S_p^{(r)}, S_p^{(v)}$ должны иметь максимум, который виден на фиг. 3. С увеличением параметра α наблюдается смещение пика для потока $S_p^{(r)}$ в сторону меньших δ . Это



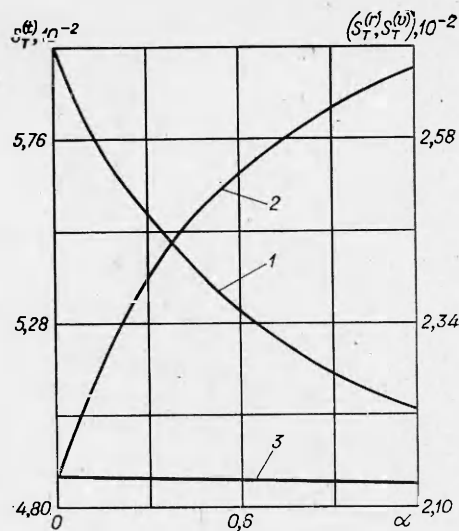
Фиг. 3



Фиг. 4



Фиг. 5



Фиг. 6

объясняется тем, что при увеличении доли неупругих столкновений вращательные степени свободы молекул возбуждаются быстрее и поток $S_p^{(r)}$ достигает максимального значения при менее плотной среде. Если бы параметр α' изменялся в более широких пределах, то аналогичное смещение пика наблюдалось бы и для $S_p^{(v)}$. Видно, что с ростом α величина $S_p^{(v)}$ уменьшается; это свидетельствует о зависимости колебательной составляющей теплового потока от доли поступательно-вращательных переходов при межмолекулярных столкновениях.

На фиг. 4 представлена зависимость полных тепловых потоков для двухатомного газа с вращательно-колебательными S_T^{RV} (кривая 1, $\alpha = 0,3$, $\alpha' = 0,001$, $c_V^r/k = c_V^v/k = 1$), только с вращательными S_T^R степенями свободы (кривая 2, $\alpha = 0,3$, $c_V^r/k = 1$) и одноатомного газа (кривая 3) от величины δ . Кривые 3 и 4 соответственно описывают изменения $S_T^{(t)}$ и $S_T^{(r)}$ для газа с вращательными и $S_T^{(t)}$ и $S_T^{(r)}$, $S_T^{(v)}$ для газа с вращательно-колебательными степенями свободы молекул. Для каждой из составляющей потока $S_T^{(t)}$, $S_T^{(r)}$ и $S_T^{(v)}$ при $\delta \gg 1$ справедлив закон теплопроводности Фурье. В почти свободномолекулярном режиме потоки $S_T^{(r)}$ и $S_T^{(v)}$ также отличны от нуля (16), поскольку имеет место процесс диффузии вращательно-колебательно-возбужденных молекул среди невозбужденных.

На фиг. 5 показан относительный вклад внутренних степеней свободы молекул в полный тепловой поток, вызванный градиентом температуры, для газа с вращательно-колебательными S_T^{RV} ($\alpha' = 0,001$, $c_V^r/k = c_V^v/k = 1$, сплошные кривые) и только с вращательными S_T^R ($c_V^r/k = 1$, штриховые кривые) степенями свободы молекул в зависимости от величины α при различных значениях параметра разреженности δ (S_T^0 — тепловой поток для одноатомного газа. Кривые 1 — $\delta = 0,01$; 2 — $\delta = 0,1$; 3 — $\delta = 1$; 4 — $\delta = 10$; 5 — $\delta = 30$): Видно, что полный тепловой поток, вызванный градиентом температуры, для всех значений δ существенно зависит от внутренних степеней свободы молекул. Для S_T^{RV} их вклад составляет от 63 до 89%, для S_T^R — от 27 до 44%. При этом наибольшее отличие от результата для одноатомного газа имеет место в пределе, близком к свободномолекулярному ($\delta = 0,01$). Это объясняется большим вкладом диффузионного переноса вращательно-колебательно-возбужденных молекул в этом режиме в тепловой поток. При увеличении доли неупругих столкновений, полный тепловой поток уменьшается, что видно на фиг. 5. Происходит это потому, что с ростом α трансляционная составляющая $S_T^{(t)}$

уменьшается на большую величину, чем увеличивается внутренняя составляющая теплового потока $S_T^{(r)}$ (фиг. 6, $\delta = 30$, кривая 1 — $S_T^{(t)}$, 2 — $S_T^{(r)}$, 3 — $S_T^{(v)}$).

В заключение отметим, что результаты данной работы могут быть использованы для обоснования и планирования экспериментальных методов определения характерных времен релаксаций в многоатомных газах.

ЛИТЕРАТУРА

1. Loyalka S. K., Storvick T. S. Kinetic theory of thermal transpiration and mechano-caloric effect. III. Flow of a polyatomic gas between parallel plates.— J. Chem. Phys., 1979, vol. 71, N 1.
2. Ganzl G., Sandler S. I. Determination of thermal transport properties from thermal transpiration measurements.— J. Chem. Phys., 1971, vol. 55, N 1.
3. Суетин П. Е., Чермянинов И. В., Черняк В. Г. Аппроксимирующее кинетическое уравнение для слабо неравновесных состояний полиатомных газов.— Изв. АН СССР. МЖГ, 1982, № 2.
4. Алиевский М. Я. Релаксация, распространение звука и процессы переноса в молекулярных газах.— Изв. АН СССР. МЖГ, 1970, № 5.
5. Гордиец Б. Ф., Осипов А. И., Шелепин Л. А. Кинетические процессы в газах и молекулярные лазеры. М.: Наука, 1980.
6. Де Гроот С., Мазур П. Неравновесная термодинамика. М.: Мир, 1964.
7. Михлин С. Г. Вариационные методы в математической физике. М.: Наука, 1970.
8. Черняк В. Г., Калинин В. В., Суетин П. Е. К теории неизотермического движения газа в плоском канале.— ИФЖ, 1979, т. 36, № 6.
9. Mason E. A., Monchick L. Heat conductivity of polyatomic and polar gases.— J. Chem. Phys., 1962, vol. 36, N 6.
10. Рид Р. Ч., Праусниц Д. М., Шервуд Т. К. Свойства газов и жидкостей. Л.: Химия, 1982.

Поступила 7/IX 1983 г.