12. **Булатов Е. Д., Виноградов Е. А. и др.** Определение времени вращательной релаксации молекул D_2O при столкновениях D_2O — D_2O, D_2O — Ar, D_2O — He в условиях сверхзвукового газового потока. Препринт ФИАН, 1981, № 24.
13. **Бакастов С. С., Конюхов В. К., Тихонов В. И.** Кинетически изолированные подсистемы вращательных уровней молекулы тяжелой воды при атом-молекулярных столкновениях.— Письма в ЖЭТФ, 1983, т. 37, с. 427.

Поступила 15/III 1984 г.

УДК 533.6.011.8

НЕИЗОТЕРМИЧЕСКОЕ ТЕЧЕНИЕ РАЗРЕЖЕННОГО МНОГОАТОМНОГО ГАЗА В КАНАЛЕ

В. М. Жданов, В. А. Зазноба

(Москва)

Проводимые до сих пор исследования неизотермического течения разреженных газов в каналах были посвящены в основном рассмотрению одноатомных газов. Известно лишь несколько работ, в которых методы, основанные на использовании кинетических уравнений, применяются для описания течения многоатомного газа [1, 2]. Интерес к неизотермическим течениям в каналах и возникающему при этом эффекту термомолекулярной разности давлений обусловлен в случае многоатомного газа возможностью определения поступательной части коэффициента теплопроводности (поступательного фактора Эйкена), что при наличии экспериментальных данных о полной теплопроводности газа может служить независимым источником информации о временах релаксации внутренней энергии, определяемых обычно из экспериментов по поглощению ультразвука либо другими методами.

В [1] задача о неизотермическом течении многоатомного газа в плоском канале решалась на основе линеаризованного кинетического уравнения Ван-Чанга и Уленбека с модельным оператором столкновений третьего порядка в форме Хансона — Морзе. При этом для расчета безразмерных величин пуазейлевского потока, потока термокрипа и потока тепла в функции обратного числа Кнудсена использовалась численная процедура решения интегральных уравнений, получаемых на основе исходного кинетического уравнения. Результаты численных расчетов для некоторых частных случаев указывают на достаточно выраженную зависимость эффекта термомолекулярной разности давлений от поступательного фактора Эйкена $f^{\text{п}}$ и слабую зависимость от полного фактора Эйкена f.

В данной работе для анализа течения многоатомного газа в плоском канале используется метод, предложенный в [3], примененный ранее в [3—5] для исследования течения одноатомных газов и газовых смесей. Хотя его применение ограничено областью чисел Кнудсена, не превышающих 0,25, к достоинствам метода относится возможность использования точного (а не модельного) оператора столкновений в кинетическом уравнении. В работе получены аналитические выражения для пуазейлевского потока, потока термокрипа и потока тепла многоатомного газа в плоском канале, справедливые в указанном диапазоне чисел Кнудсена, и проводится сравнение с результатами численных расчетов [1].

Рассмотрим медленное течение многоатомного газа в плоском канале, ограниченном при $x = \pm d/2$ двумя бесконечными параллельными плоскостями. Пусть в направлении z существуют малые относительные градиенты давления ($k = p_0^{-1}dp/dz$) и температуры ($\tau = T_0^{-1}dT/dz$). Решение для функции распределения молекул можно при этом искать в виде

$$(1)\quad f_i(\mathbf{v}, x, z, \varepsilon_i) = f_{i0}\left[1 + kz + \tau z\left(\beta v^2 - \frac{5}{2} + \varepsilon_i - \bar{\varepsilon}\right) + \Phi_i(\mathbf{v}, x, \varepsilon_i)\right],$$

$$f_{i0} = n_0\left(\frac{m}{2\pi k_\text{Б} T_0}\right)^{3/2} Q_0^{-1}\exp(-\beta v^2 - \varepsilon_i), \quad \beta = m/2k_\text{Б}T_0.$$

Здесь индекс 0 соответствует параметрам абсолютного максвелл-больцмановского распределения; $\varepsilon_i = E_i/k_\text{Б}T_0$; E_i — внутренняя энергия молекулы, находящейся в i-м квантовом состоянии; $\bar{\varepsilon} = Q_0^{-1}\sum_i \varepsilon_i \exp(-\varepsilon_i)$; $Q_0 = \sum_i \exp(-\varepsilon_i)$. Неравновесная добавка к функции распределения

$\Phi_i(\mathbf{v}, x, \varepsilon_i)$ определяется из линеаризованного кинетического уравнения Ван-Чанга и Уленбека [6]

$$v_x \frac{\partial \Phi_i}{\partial x} + v_z k + v_z \tau \left(\beta v^2 - \frac{5}{2} + \varepsilon_i - \bar{\varepsilon}\right) = \tag{2}$$

$$= \sum_{jkl} \int f_{j0} \left(\Phi'_k + \Phi'_{1l} - \Phi_i - \Phi_{1j}\right) g\sigma\left(ij/kl, g, \chi\right) d\Omega d\mathbf{v}_1.$$

Умножая (2) последовательно на $\Psi(\mathbf{c}, \varepsilon_i) \exp(-c^2 - \varepsilon_i)$, где $\Psi(\mathbf{c}, \varepsilon_i) = c_r$, $c_r c_s - (1/3)c^2\delta_{rs}$, $c_r(c^2 - 5/2)$, $c_r c_s c_t - (1/5)c^2(c_r\delta_{st} + c_s\delta_{rt} + c_t\delta_{rs})$, $c_r(\varepsilon_i - \bar{\varepsilon})$, $\mathbf{c} = \beta^{1/2}\mathbf{v}$, интегрируя но скоростям и суммируя по i-м квантовым состояниям, приходим для плоской геометрии задачи к уравнениям моментов вида

$$p_0 k + \frac{\partial}{\partial x}\pi_{xz} = 0; \tag{3}$$

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(m s_{zxx} + \frac{2}{5} q_z^{\text{п}} + p_0 u_z\right) = -\frac{8 n_0 \Omega_\eta}{5}\pi_{xz}; \tag{4}$$

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(M_{zxxx} + M_{zxyy} + M_{zxzz}\right) + 5\frac{p_0^2}{\rho_0 m}(k + \tau) = \tag{5}$$

$$= -\frac{32}{15}\frac{n_0}{m}\left(\Omega_\eta + \frac{25}{24}\Omega_E\right) q_z^{\text{п}} + \frac{10 k_{\text{Б}} n_0}{3 c^{\text{вн}} m}\Omega_E q_z^{\text{вн}};$$

$$\frac{\partial}{\partial x} M_{xz}^{\varepsilon} + \frac{p_0 c^{\text{вн}}}{k_{\text{Б}} m}\tau = \frac{2}{3} n_0^2 \Omega_E \frac{1}{p_0} q_z^{\text{п}} - \frac{8}{3} n_0^2 \left(\Omega_D + \frac{3 k_{\text{Б}}}{8 c^{\text{вн}}}\Omega_E\right)\frac{1}{p_0} q_z^{\text{вн}}; \tag{6}$$

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(4M_{zxxx} - M_{zxyy} - M_{zxzz}\right) = -12 n_0 \Omega_\eta s_{zxx}; \tag{7}$$

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(4M_{zxyy} - M_{zxxx} - M_{zxzz}\right) = -12 n_0 \Omega_\eta s_{zyy}; \tag{8}$$

$$s_{zxx} + s_{zyy} + s_{zzz} = 0. \tag{9}$$

Правые части уравнений (4) — (6) совпадают с выражениями, полученными в приближении 17 моментов в [7]. Дополнительные моменты интегралов столкновений, появляющиеся в уравнениях (7) и (8), получаются при учете еще одного полинома вида $c_r c_s c_t - (1/5)c^2(c_r\delta_{st} + c_s\delta_{rt} + c_t\delta_{rs})$, использование которого в случае однокомпонентных газов соответствует 20-моментному приближению. При этом в (3) — (9) u_z— гидродинамическая скорость; π_{xz} — тензор вязких напряжений; $q_z^{\text{п}}$ — тепловой поток, обусловленный поступательным движением молекул; $q_z^{\text{вн}}$ — тепловой поток, обусловленный внутренними степенями свободы молекул. Выражения для этих моментов, а также для моментов более высокого порядка s_{rst}, M_{rs}^{ε} и M_{rstk} записываются в виде

$$\begin{bmatrix} u_r \\ \pi_{rs} \\ q_r^{\text{п}} \\ q_r^{\text{вн}} \\ m s_{rst} \\ \\ m M_{rs}^{\varepsilon} \\ m M_{rstk} \end{bmatrix} = 2 p_0 \beta^{-1/2}\pi^{-3/2} Q_0^{-1} \sum_i \int \begin{bmatrix} (2p_0)^{-1} c_r \\ \beta^{1/2}\left(c_r c_s - \frac{1}{3}c^2\delta_{rs}\right) \\ \frac{1}{2} c_r\left(c^2 - \frac{5}{2}\right) \\ \frac{1}{2} c_r\left(\varepsilon_i - \bar{\varepsilon}\right) \\ c_r c_s c_t - \frac{1}{5}c^2\left(c_r\delta_{st} + \right. \\ \left. + c_s\delta_{rt} + c_t\delta_{rs}\right) \\ \beta^{1/2} c_r c_s\left(\varepsilon_i - \bar{\varepsilon}\right) \\ \beta^{-1/2} c_r c_s c_t c_k \end{bmatrix} \times \tag{10}$$

$$\times \Phi_i \exp\left(-c^2 - \varepsilon_i\right) d\mathbf{c}.$$

Теплоемкость $c^{\text{вн}}$, соответствующая внутренним степеням свободы, и интегральные величины Ω_E, Ω_η, Ω_D определены в [7].

Вдали от стенок система уравнений должна соответствовать приближению, полученному в рамках обычного метода Грэда, обобщенного на случай многоатомного газа в [7, 8]. Функция распределения в этой области после линеаризации ее с учетом малости величин u_z, π_{xz}, $q_z^{\text{п}}$, $q_z^{\text{вн}}$, s_{rst} может быть записана в виде

$$\Phi_i^{\text{ac}}(\mathbf{c}, x, \varepsilon_i) = 2\beta^{1/2}u_z^{\text{ac}}c_z + 2p_0^{-1}\pi_{xz}^{\text{ac}}c_xc_z + \frac{4}{5}p_0^{-1}\beta^{1/2}q_z^{\text{п.ac}}c_z\left(c^2 - \frac{5}{2}\right) + \tag{11}$$

$$+ 2k_{\text{Б}}\beta^{1/2}\left(p_0c^{\text{вн}}\right)^{-1}q_z^{\text{вн.ac}}c_z(\varepsilon_i - \bar{\varepsilon}) + 2\beta^{1/2}p_0^{-1}mc_z\left(s_{zxx}^{\text{ac}}c_x^2 + \right.$$

$$\left. + s_{zyy}^{\text{ac}}c_y^2 + \frac{1}{3}s_{zzz}^{\text{ac}}c_z^2\right),$$

где индексом ас показаны асимптотические значения соответствующих величин, т. е. значения вне слоя Кнудсена.

Подставляя (11) в M_{rs}^{ε} и M_{rstk}, интегрируя по скоростям и суммируя по i-м квантовым состояниям, имеем

$$M_{zxxx}^{\text{ac}} = \frac{3\pi_{xz}^{\text{ac}}}{2m\beta}, \quad M_{zxyy}^{\text{ac}} = \frac{\pi_{xz}^{\text{ac}}}{2m\beta}, \quad M_{zxzz}^{\text{ac}} = \frac{3\pi_{xz}^{\text{ac}}}{2m\beta}, \quad M_{xz}^{\varepsilon\text{ac}} = 0. \tag{12}$$

Решение системы уравнений (3) — (9) с учетом (12) и симметрии задачи относительно продольной оси канала ($\Phi_i(x, c_x, c_y, c_z, \varepsilon_i) = \Phi_i(-x, -c_x, c_y, c_z, \varepsilon_i)$) позволяет получить явные выражения для u_z^{ac}, π_{xz}^{ac}, $q_z^{\text{п.ac}}$, $q_z^{\text{вн.ac}}$, s_{rst}^{ac}:

$$u_z^{\text{ac}}(x) = u_z^{\text{ac}}\left(\frac{d}{2}\right) + \frac{1}{2\eta}\left(x^2 - \frac{d^2}{4}\right)\frac{dp}{dz}, \quad \pi_{xz}^{\text{ac}}(x) = -x\frac{dp}{dz}, \tag{13}$$

$$q_z^{\text{п.ac}} = -\lambda^{\text{п}}\frac{dT}{dz} + \chi^{\text{п}}\frac{dp}{dz}, \quad q_z^{\text{вн.ac}} = -\lambda^{\text{вн}}\frac{dT}{dz} + \chi^{\text{вн}}\frac{dp}{dz},$$

$$s_{zxx}^{\text{ac}} = \frac{16}{15}\frac{\eta}{m\rho_0}\frac{dp}{dz}, \quad s_{zyy}^{\text{ac}} = -\frac{1}{4}s_{zxx}^{\text{ac}}, \quad s_{zzz}^{\text{ac}} = -\frac{3}{4}s_{zxx}^{\text{ac}},$$

где

$$\lambda^{\text{п}} = \frac{15k_{\text{Б}}}{4m}\eta\left\{1 - \frac{4c^{\text{вн}}}{3\pi k_{\text{Б}}Z\Delta}\left[\frac{5}{2} - \left(\frac{\rho_0D^{\text{вн}}}{\eta}\right)\right]\right\}; \tag{14}$$

$$\lambda^{\text{вн}} = \left(\frac{\rho_0D^{\text{вн}}}{\eta}\right)\frac{c^{\text{вн}}}{m}\eta\left\{1 + \frac{2}{\pi Z\Delta}\left[\frac{5}{2} - \left(\frac{\rho_0D^{\text{вн}}}{\eta}\right)\right]\right\}, \tag{15}$$

$$\chi^{\text{п}} = \frac{3\eta}{2\rho_0}\left(1 - \frac{10\,c^{\text{вн}}}{3\pi k_{\text{Б}}Z\Delta}\right), \quad \chi^{\text{вн}} = \frac{2c^{\text{вн}}}{\pi k_{\text{Б}}\rho_0Z\Delta}\eta\left(\frac{\rho_0D^{\text{вн}}}{\eta}\right),$$

$$\Delta = 1 + \frac{2}{\pi Z}\left[\left(\frac{\rho_0D^{\text{вн}}}{\eta}\right) + \frac{5c^{\text{вн}}}{3k_{\text{Б}}}\right].$$

При этом $Z = \frac{4}{\pi}\frac{\tau_E}{\tau_\eta}$, $\rho_0D^{\text{вн}} = p_0\tau_D$, $\eta = \rho_0\tau_\eta$, $\tau_E^{-1} = \left(2k_{\text{Б}}/c^{\text{вн}}\right)n_0\Omega_E$, $\tau_\eta^{-1} = 8n_0\Omega_\eta/5$, $\tau_D^{-1} = 8n_0\Omega_D/3$.

Здесь Z соответствует среднему числу столкновений, необходимому для релаксации отклонений энергии внутренних степеней свободы от поступательной энергии; $D^{\text{вн}}$ — коэффициент диффузии внутренней энергии.

Следуя методу [3—5], найдем усредненные по сечению канала выражения для теплового потока и гидродинамической скорости. Из решения (3) вытекает, что во всей области течения справедливо соотношение

$$\pi_{xz}(x) = -x\,dp/dz. \tag{16}$$

Подставляя это значение в (4), интегрируя полученное соотношение по x и усредняя по сечению канала, имеем

(17) $$m\langle s_{zxx}\rangle + \frac{2}{5}\langle q_z^{\text{п}}\rangle + p_0\langle u_z\rangle = L_1,$$

где $L_1 = ms_{zxx}\left(\frac{d}{2}\right) + \frac{2}{5}q_z^{\text{п}}\left(\frac{d}{2}\right) + p_0u_z\left(\frac{d}{2}\right) - \frac{p_0d^2}{12\eta}\frac{dp}{dz}$; $\langle Q\rangle = d^{-1}\int\limits_{-d/2}^{d/2} Q(x)\,dx$.

Усредняя также уравнения (5) — (7) по сечению канала, получим

(18) $$-\frac{4p_0}{3m\eta}\left(1 + \frac{10c^{\text{вн}}}{3\pi k_{\text{Б}}Z}\right)\langle q_z^{\text{п}}\rangle + \frac{20p_0}{3\pi m\eta Z}\langle q_z^{\text{вн}}\rangle = L_2,$$

$$\frac{4n_0c^{\text{вн}}}{3\pi k_{\text{Б}}\eta Z}\langle q_z^{\text{п}}\rangle - \frac{n_0}{\eta}\left(\frac{\rho_0D^{\text{вн}}}{\eta}\right)^{-1}\left[1 + \frac{2}{\pi Z}\left(\frac{\rho_0D^{\text{вн}}}{\eta}\right)\right]\langle q_z^{\text{вн}}\rangle = L_3,$$

$$-\frac{15p_0}{2\eta}\langle s_{zxx}\rangle = L_4,$$

где $L_2 = \frac{2}{d}\left[M_{zxxx}\left(\frac{d}{2}\right) + M_{zxyy}\left(\frac{d}{2}\right) + M_{zxzz}\left(\frac{d}{2}\right)\right] + \frac{5p_0^2}{m\rho_0}(k+\tau)$; $L_3 = \frac{2}{d}M_{xz}^{\varepsilon}\left(\frac{d}{2}\right) + \frac{p_0c^{\text{вн}}}{k_{\text{Б}}m}\tau$; $L_4 = \frac{2}{d}\left[4M_{zxxx}\left(\frac{d}{2}\right) - M_{zxyy}\left(\frac{d}{2}\right) - M_{zxzz}\left(\frac{d}{2}\right)\right]$.

Решение (17), (18) приводит к результатам

(19) $$\langle u_z\rangle = \frac{1}{p_0}L_1 + \frac{m\rho_0}{5p_0^2}\chi^{\text{п}}L_2 + \frac{mk_{\text{Б}}}{p_0c^{\text{вн}}}\chi^{\text{вн}}L_3 + \frac{2m\eta}{15p_0^2}L_4,$$

$$\langle q_z\rangle = \langle q_z^{\text{п}}\rangle + \langle q_z^{\text{вн}}\rangle = -\frac{m^2\lambda^{\text{п}}}{5k_{\text{Б}}p_0}L_2 - \frac{m\lambda^{\text{вн}}}{n_0c^{\text{вн}}}L_3.$$

Для определения неизвестных величин на стенке канала воспользуемся приближенным методом [9]. Введем функции распределения падающих и отраженных молекул, так что $\Phi_i = \Phi_i^+$ для $c_x > 0$ и $\Phi_i = \Phi_i^-$ для $c_x < 0$. В качестве кинетического граничного условия примем, что часть падающих молекул отражается зеркально (без изменения распределения по внутренним состояниям молекул), а другая часть сначала адсорбируется стенкой, а затем испускается с распределением Максвелла — Больцмана при температуре T. Согласно (11), для функций $\Phi_i^{\pm}$ при $x = d/2$ имеем

(20) $$\Phi_i^+(\mathbf{c}, \varepsilon_i, d/2) = 2\beta^{1/2}c_za + 2p_0^{-1}\pi_{xz}^{\text{ac}}\left(\frac{d}{2}\right)c_xc_z + \frac{4}{5}p_0^{-1}\beta^{1/2}q_z^{\text{п.ac}}c_z\left(c^2 - \frac{5}{2}\right) + 2k_{\text{Б}}\beta^{1/2}(p_0c^{\text{вн}})^{-1}q_z^{\text{вн.ac}}c_z(\varepsilon_i - \bar{\varepsilon}) + 2\beta^{1/2}p_0^{-1}mc_z\left(s_{zxx}^{\text{ac}}c_x^2 + s_{zyy}^{\text{ac}}c_y^2 + \frac{1}{3}s_{zzz}^{\text{ac}}c_z^2\right), \quad c_x > 0,$$

$$\Phi_i^-(\mathbf{c}, \varepsilon_i, d/2) = (1-\varkappa)\Phi_i^+(-c_x, c_y, c_z, \varepsilon_i, d/2), \quad c_x < 0,$$

где $\varkappa$ — доля молекул, испытавших диффузное отражение на стенке, а вместо $u_z^{\text{ac}}(d/2)$ вводится произвольная постоянная a.

Используя (16) и определение π_{xz} (10) на стенке канала, после вычисления соответствующих интегралов с учетом (20) находим

(21) $$a = -\beta^{-1/2}\frac{\sqrt{\pi}}{4}d\frac{(2-\varkappa)}{\varkappa p_0}\frac{dp}{dz} - \frac{1}{5p_0}q_z^{\text{п.ac}} - \frac{m}{2p_0}s_{zxx}^{\text{ac}}.$$

Подставляя (21) в (20), получим неизвестные величины на стенке канала, входящие в L_i.

Согласно термодинамике необратимых процессов для прерывных систем [10], связь между потоками и градиентами можно представить как

$$\langle q_z \rangle = -\Lambda_{qq} T^{-2} \frac{dT}{dz} - \Lambda_{qm} T^{-1} \frac{dp}{dz}, \tag{22}$$

$$\langle \bar{u}_z \rangle = -\Lambda_{mq} T^{-2} \frac{dT}{dz} - \Lambda_{mm} T^{-1} \frac{dp}{dz}.$$

Введем безразмерные величины

$$J_m^* = J_m/mJ_0 = 2\beta^{1/2} \langle u_z \rangle, \; J_q^* = J_q/k_Б T_0 J_0 = 2\beta^{1/2} p_0^{-1} \langle q_z \rangle,$$

где J_m и J_q — соответствующие усредненные потоки массы и тепла, отнесенные к единице площади сечения канала; $J_0 = n_0/2\beta^{1/2}$. При этом $J_m^* = -L_{mm}kd - L_{mq}\tau d, \quad J_q^* = -L_{qm}kd - L_{qq}\tau d$.

Выражения для безразмерных кинетических коэффициентов L_{ik}, получаемых при сравнении (22) с (19), имеют вид

$$L_{mm} = \frac{\delta}{6} + (2-\varkappa)\left[\frac{(2-\varkappa)}{\varkappa}\frac{\sqrt{\pi}}{4} + \frac{1}{\sqrt{\pi}}\right] + \frac{\varkappa\rho_0}{5\eta}\left(\chi^{п} + \frac{8}{3}\frac{\eta}{\rho_0}\right)\frac{1}{\delta} - \tag{23}$$

$$- \frac{32\varkappa}{25\sqrt{\pi}}\left\{\frac{\rho_0}{3\eta}\left(\chi^{п} + \frac{3\eta}{\rho_0}\right) + \frac{3\rho_0^2}{8\eta^2}\left[(\chi^{п})^2 + \frac{25}{12}\frac{k_Б}{c^{вн}}(\chi^{вн})^2\right]\right\}\frac{1}{\delta^2};$$

$$L_{mq} = L_{qm} = -\frac{(2+\varkappa)\,m}{10k_Б\eta}\lambda^{п}\frac{1}{\delta} + \frac{12\varkappa m\rho_0}{25\sqrt{\pi}k_Б\eta^2}\left[\lambda^{п}\left(\chi^{п} + \frac{4}{9}\frac{\eta}{\rho_0}\right) + \right. \tag{24}$$

$$\left. + \frac{25}{12}\frac{k_Б}{c^{вн}}\lambda^{вн}\chi^{вн}\right]\frac{1}{\delta^2};$$

$$L_{qq} = \frac{m\lambda}{k_Б\eta}\frac{1}{\delta} - \frac{12\varkappa m^2}{25\sqrt{\pi}\,k_Б^2\eta^2}\left[(\lambda^{п})^2 + \frac{25}{12}\frac{k_Б}{c^{вн}}(\lambda^{вн})^2\right]\frac{1}{\delta^2}, \tag{25}$$

где $\delta = \mathrm{Kn}^{-1} = p_0\beta^{1/2}d/\eta$ — обратное число Кнудсена; $\lambda = \lambda^{п} + \lambda^{вн}$.

В [1] приводятся результаты численного расчета коэффициентов L_{mm}, L_{mq} и L_{qq} для плоского канала для случая полностью диффузного отражения ($\varkappa = 1$) в функции обратного числа Кнудсена δ. При этом анализируются зависимости этих коэффициентов от полного и поступательного факторов Эйкена, определяемых как

$$f = f^{п}\frac{c^{п}}{c_V} + f^{вн}\frac{c^{вн}}{c_V}, \quad f^{п} = \frac{\lambda^{п}m}{\eta c^{п}}, \quad f^{вн} = \frac{\lambda^{вн}m}{\eta c^{вн}}.$$

В расчетах полагалось $c^{п} = 3k_Б/2$, $c^{вн} = k_Б$.

Для сравнения с результатами [1] можно выразить входящие в выражения (23) — (25) величины $\lambda^{п}$, $\lambda^{вн}$, $\chi^{п}$, $\chi^{вн}$ через $f^{п}$ и f с учетом соотношений, следующих из (14) и (15).

В табл. 1 приводится сравнение результатов расчета кинетических коэффициентов для $f = 1{,}96$ и $f^{п} = 2{,}24$ на основе выражений (23) — (25)

Таблица 1

δ	$f^{п}=2{,}24$			$f=1{,}96$		
	L_{mm}		$-L_{mq}$		L_{qq}	
	1	2	1	2	1	2
3	1,6085	1,7154	0,1560	0,2054	1,1450	1,2230
5	1,9384	1,9952	0,1368	0,1491	0,8042	0,8218
7	2,2551	2,2988	0,1109	0,1170	0,6103	0,6178
10	2,7367	2,7717	0,0846	0,0883	0,4460	0,4494
20	4,3755	4,4003	0,0463	0,0481	0,2340	0,2348
30	6,0313	6,0580	0,0318	0,0330	0,1584	0,1588
40	7,6923	7,7326	0,0242	0,0251	0,1198	0,1199

Таблица 2

δ	$-L_{mq}/L_{mm}$					
	$f=1,96$; $f^{п}=2,31$		$f=1,96$; $f^{п}=2,24$		$f=1,96$; $f^{п}=2,17$	
	1	2	1	2	1	2
3	0,0980	0,1225	0,0970	0,1197	0,0952	0,1167
5	0,0721	0,0767	0,0706	0,0747	0,0688	0,0727
7	0,0504	0,0523	0,0492	0,0509	0,0479	0,0494
10	0,0318	0,0328	0,0309	0,0318	0,0300	0,0309
20	0,0109	0,0112	0,0106	0,0109	0,0103	0,0106
30	0,0054	0,0056	0,0053	0,0054	0,0051	0,0052
40	0,0032	0,0033	0,0031	0,0032	0,0030	0,0031

настоящей работы для случая полностью диффузного отражения ($\varkappa = 1$) (первая колонка) и по данным [1] (вторая колонка) для значений $\delta \geqslant 3$.

Сравнение показывает, что значения коэффициентов, рассчитанные на основе (23) — (25), оказываются несколько заниженными, причем для коэффициентов L_{mm} и L_{qq} отличие от результатов [1] не превышает 3% и для L_{mq} — от 4 до 10% при $\delta \geqslant 5$ (Kn $\leqslant 0{,}2$). В пределе малых чисел Кнудсена наши результаты полностью согласуются с данными, использующими значения коэффициентов вязкого и теплового скольжения, полученных с помощью вариационного метода в [11]. Расчеты коэффициентов для $f = 1{,}92$; 1,96 и 2,0 при фиксированном $f^{п} = 2{,}24$ подтверждают выводы [1] о слабой чувствительности этих коэффициентов к изменению полного фактора Эйкена. Вместе с тем, как и в [1], обнаруживается явно выраженная зависимость коэффициента L_{mq} от поступательного фактора Эйкена $f^{п}$ при $f = \mathrm{const}$. Как известно, эффект термомолекулярной разности давлений (возникновение разности давлений Δp между объемами, соединенными тонким капилляром или щелью при фиксированной разности температур ΔT) определяется выражением

$$\frac{\Delta p/p_0}{\Delta T/T_0} = -\frac{L_{mq}}{L_{mm}}.$$

В табл. 2 приводится сравнение значений отношения $-L_{mq}/L_{mm}$, рассчитанных по формулам настоящей работы (первая колонка) и в [1] (вторая колонка) при $f = 1{,}96$ для $f^{п} = 2{,}17$; 2,24; 2,31. Наблюдаемая зависимость от $f^{п}$ подтверждает возможность использования эффекта термомолекулярной разности давлений для определения времени релаксации внутренней энергии (или фактора Z).

ЛИТЕРАТУРА

1. **Loyalka S. K., Storvick T. S.** Kinetic theory of thermal transpiration and mechanocaloric effect. III. Flow of a polyatomic gas between parallel plates.— J. Chem. Phys., 1979, v. 71, N 1.
2. **Loyalka S. K., Storvick T. S., Lo S. S.** Thermal transpiration and mechanocaloric effect. IV. Flow of a polyatomic gas in a cylindrical tube.— J. Chem. Phys., 1982, v. 76, N 8.
3. **Жданов В. М., Зазноба В. А.** Неизотермическое течение газовой смеси в канале при промежуточных числах Кнудсена.— ПММ, 1981, т. 45, вып. 6.
4. **Жданов В. М., Зазноба В. А.** Неизотермическое течение разреженного газа в круглом цилиндрическом канале.— ИФЖ, 1983, т. 44, № 5.
5. **Жданов В. М., Зазноба В. А.** Течение газовой смеси в цилиндрическом канале при промежуточных числах Кнудсена.— ИФЖ, 1983, т. 45, № 3.
6. **Wang-Chang C. S., Uhlenbeck G. E., de Boer J.** The heat conductivity and viscosity of polyatomic gases.— In: Studies in statistical mechanics, v. 2/Ed. J. de Boer, G. E. Uhlenbeck. Amsterdam: North-Holland Publ. Company, 1964.
7. **Жданов В. М.** К кинетической теории многоатомного газа.— ЖЭТФ, 1967, т. 53, вып. 6(12).
8. **Жданов В. М.** Явления переноса в многокомпонентной плазме. М.: Энергоиздат, 1982.

9. **Loyalka S. K.** Approximate method in the kinetic theory.— Phys. Fluids, 1971, v. 14, N 11.
10. **Гроот С. де, Мазур П.** Неравновесная термодинамика. М.: Мир, 1964.
11. **Loyalka S. K.** The slip problem for a simple gas.— Z. Naturforsch., 1971, Bd 26 A, S. 964.

Поступила 3/I 1984 г.

УДК 533.6.011.8

УРАВНЕНИЯ КОЛЕБАТЕЛЬНОЙ И ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ В СЛОЖНОЙ ГАЗОВОЙ СМЕСИ

О. В. Скребков

(Черноголовка)

В последние два десятилетия, благодаря развитию вычислительной техники, а также достижениям экспериментальной и теоретической науки о кинетике элементарных процессов в газовых системах, как инструмент исследования, дополняющий или даже полностью заменяющий трудоемкий эксперимент, широкое распространение получили расчеты сложных по составу и газодинамике смесей. В частности, существует широкий класс задач расчета течения многокомпонентной газовой смеси, требующих совместного учета кинетики химических реакций и процессов колебательного энергообмена. В большинстве такого рода задач на основе использования упрощающих предположений кинетические уравнения формулируются в виде макроскопических уравнений для концентраций и средних колебательных энергий компонентов или отдельных колебательных степеней свободы (мод) (см., например, [1, 2]). Однако при решении ряда задач (например, при моделировании течений рабочих сред химических лазеров [3]) принципиальное значение может иметь знание заселенностей колебательных уровней отдельных молекулярных компонентов смеси, изменяющихся в результате химического и колебательного взаимодействия с большим числом других компонентов. Последовательная же формулировка кинетических уравнений в виде уравнений баланса заселенностей колебательных состояний большого числа компонентов сложной смеси, не говоря уже о чрезвычайной трудоемкости их решения совместно с уравнениями газодинамики, очевидно, просто не имеет практического смысла из-за отсутствия требующейся в таком случае подробной информации о количественных характеристиках очень большого числа элементарных процессов.

К значительному сокращению учитываемых колебательных состояний и связанных с ними элементарных процессов по сравнению с последовательным микроскопическим подходом приводит такая формулировка кинетических уравнений, в которой одна группа химических компонентов и колебательных состояний рассматривается микроскопически (т. е. в виде уравнений баланса заселенностей), а другая — макроскопически (т. е. в виде уравнений для средних колебательных энергий и концентраций). В данной работе дается пример такой комбинированной формулировки кинетических уравнений. Здесь подсистемой, рассматриваемой микроскопически, является смесь двухатомных газов — ангармонических осцилляторов, химически и колебательно взаимодействующих между собой и с другими в общем случае многоатомными компонентами, составляющими подсистему, рассматриваемую макроскопически.

1. Кинетические процессы и предположения. При формулировке кинетических уравнений используются следующие упрощающие предположения: а) химические реакции не нарушают максвелловского распределения; б) вращательные степени свободы находятся в равновесии с поступательными; в) каждый тип колебаний (мода) молекул, рассматриваемых макроскопически, моделируется гармоническим осциллятором с бесконечно малым характерным временем VV-обмена внутри моды, и в качестве меры средней энергии такой моды (например, k-й) используется колебательная температура T_k; г) молекулы компонентов, рассматриваемых микроскопически, моделируются осцилляторами Морзе.

В качестве возможных элементарных процессов постулируются следующие.

1. Интегральные или макроскопические химические реакции, приводящие к изменению концентраций компонентов в целом:

$$\sum_{j=1}^{N} \nu_{jr} Y_j \underset{k'_r}{\overset{k_r}{\rightleftarrows}} \sum_{j=1}^{N} \nu'_{jr} Y_j, \tag{1.1}$$

где Y_j — j-й химический компонент; ν_{jr}, ν'_{jr} — стехиометрические коэф-