

Math-Net.Ru

All Russian mathematical portal

V. Ya. Rudyak, Transport-coefficients for a nonideal gas, *TVT*, 1989, Volume 27, Issue 4, 697–701

Use of the all-Russian mathematical portal Math-Net.Ru implies that you have read and agreed to these terms of use

<http://www.mathnet.ru/eng/agreement>

Download details:

IP: 3.238.202.29

November 11, 2024, 17:14:07



УДК 532:533:536.423.1

КОЭФФИЦИЕНТЫ ПЕРЕНОСА НЕИДЕАЛЬНОГО ГАЗА

Рудяк В. Я.

Построено решение модельного кинетического уравнения неидеального газа. Выведены формулы для коэффициентов переноса с учетом вкладов нелокальности взаимодействия молекул, памяти и многочастичных столкновений. Применимость полученных формул проанализирована на примере коэффициента вязкости умеренно плотного газа. Полученные результаты сравниваются с теоретическими и экспериментальными данными.

Расчету коэффициентов переноса неидеального газа посвящено огромное число работ, тем не менее к настоящему времени отсутствует последовательная методика их вывода. Ситуация осложняется тем, что, исходя из строгой теории, не удастся сформулировать конструктивного метода их вычисления, поскольку в соответствующие кинетические уравнения входят операторы многочастичного рассеяния. Необходимо использовать модельные представления. Наиболее распространенная теория основана на кинетическом уравнении Энского [1] для газа твердых сфер. Неплохо предсказывая зависимость коэффициентов переноса от плотности, эта теория, однако, неправильно описывает их изменения с температурой и особенно неудовлетворительна при больших и малых энергиях молекул газа.

В [2, 3] на базе строгой теории построено модельное кинетическое уравнение для неидеального газа с реальными потенциалами взаимодействия

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \mathbf{v}_i \cdot \frac{\partial f_i}{\partial \mathbf{r}_i} = \frac{1}{m} \int dx_2 \frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{r}_1} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_1} \chi S_{-f_1}(t_0) f_2(t_0), \quad (1)$$

где Φ — потенциал межмолекулярного взаимодействия; f_i — одночастичная функция распределения молекулы i ; $\chi = \exp(\Phi/kT)$; ρ_2 — квазиравновесная конфигурационная функция распределения; $x_i = (\mathbf{r}_i, \mathbf{v}_i)$ — фазовые переменные молекулы i ; $S_{-} = \lim_{t \rightarrow t_0} S_{-(t-t_0)}$; S_i — обычный динамический

оператор сдвига по траектории двух частиц; τ_0 — эффективное время взаимодействия молекул; k — постоянная Больцмана; T — температура газа.

В кинетическом уравнении (1) учтены эффекты неидеальности, связанные с нелокальностью взаимодействия молекул и запаздыванием, а посредством функции χ — многочастичные столкновения. Таким образом, уравнение (1), в отличие от уравнений Энского, применимо для газов с реальными потенциалами взаимодействия и учитывает влияние на процессы переноса запаздывания и корреляции запаздывания и пространственной нелокальности. В данной работе уравнение (1) решено методом Чепмена — Энского [1], выведены формулы для коэффициентов переноса и подробно проанализирован случай умеренно плотного газа.

При малых отклонениях от равновесия (линейное по градиентам гидродинамических величин приближение) интеграл столкновения уравнения (1) следует локализовать, раскладывая функции χ и f_i в ряд по координатам вблизи точки \mathbf{r}_i и времени $-t$. В результате уравнение (1) принимает вид

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \mathbf{v}_i \cdot \frac{\partial f_i}{\partial \mathbf{r}_i} = \sum_{i=0}^3 \frac{2}{m} \int dx dg \frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{r}} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{g}} \Delta_i \equiv \sum_{i=0}^3 J_i, \quad (2)$$

$$\Delta_0 = \chi f_{10} f_{20}, \quad f_{i0} = f_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_{i0}, t), \quad \mathbf{v}_{i0} = S - \mathbf{v}_i, \quad (3a)$$

$$\Delta_1 = (1/2) \mathbf{r} \cdot \nabla (\chi f_{10} f_{20}), \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1, \quad (3b)$$

$$\Delta_2 = (1/2) \mathbf{r}' \cdot (f_{10} \nabla f_{20} - f_{20} \nabla f_{10}) \chi, \quad (3b)$$

$$\Delta_3 = -(t - t_0) \chi \left(\frac{\partial}{\partial t} f_{10} f_{20} + \sum_{\substack{i=1,2 \\ i \neq j}} \mathbf{v}_{i0} \cdot \frac{\partial f_{i0}}{\partial \mathbf{r}_{i0}} f_{j0} \right), \quad (3r)$$

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r}_0 + \mathbf{g}_0(t - t_0) \equiv \mathbf{r}_0 + \mathbf{g}_0 s_0, \quad \mathbf{r}_0 = S - \mathbf{r},$$

$$\mathbf{g}_0 = S - \mathbf{g}, \quad \mathbf{g} = \mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1.$$

Нетрудно убедиться, что при описании гидродинамического режима течения это уравнение содержит малый параметр — число Кнудсена K , и его решение можно записать в виде ряда: $f_1 = f_1^{(0)} + K f_1^{(1)} + \dots$. Функция распределения нулевого приближения удовлетворяет нелинейному однородному уравнению и является локально максвелловской. Поэтому вектор потока тепла в рассматриваемом приближении $q^{(0)} = 0$, а тензор напряжений $P^{(0)} = p\mathbf{U} = nkT(1 + nb)\mathbf{U}$, где n , T , p — соответственно плотность, температура и давление газа, \mathbf{U} — единичный тензор второго ранга, а полная энергия определяется выражением

$$e = \frac{3}{2} RT + \frac{n}{2m} \int d\mathbf{r} \rho_2 \Phi,$$

$$b = -\frac{2\pi}{3kT} \int d\mathbf{r} r^3 \rho_2 \Phi'.$$

Таким образом, в нулевом приближении гидродинамические переменные n , \mathbf{u} , e (\mathbf{u} — макроскопическая скорость газа) удовлетворяют уравнениям Эйлера неидеального газа.

Функция распределения первого приближения $f_1^{(1)} = f_1^{(0)} \Phi_1$ является решением линейного неоднородного интегрального уравнения

$$\frac{2}{m} \iint d\mathbf{r} d\mathbf{g} \frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{r}} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{g}} \chi f_{10}^{(0)} f_{20}^{(0)} (\varphi_{10} + \varphi_{20}) = \partial f_1^{(0)} / \partial t + \mathbf{v}_1 \cdot \nabla f_1^{(0)} - J_{10} - J_{20} - J_{30}, \quad (4)$$

где интегралы столкновений J_{i0} получаются из соответствующих интегралов J_i заменой f_1 на f_{i0} ; $\varphi_{i0} = \varphi_i(\mathbf{v}_{i0})$. Следуя [4], можно показать, что $J_{10} = -\nabla \cdot (nb\mathbf{v}_1 f_{10})$,

$$J_{30} + J_{20} = -\sigma^3 \sqrt{\frac{4kT}{m}} \int d\mathbf{v}_2 \frac{\partial}{\partial \mathbf{g}_i} \cdot f_1^{(0)} f_2^{(0)} \{ [o_1 e_i U_{jk} + o_2 e_j U_{ih} + o_3 e_k U_{ij} + o_4 e_i e_j e_k] G_k \nabla_j \ln T + [o_1' e_i U_{jk} + o_2' e_j U_{ih} + o_3' e_k U_{ij} + o_4' e_i e_j e_k] \nabla_j u_k \},$$

$$o_1' = \frac{1}{kT\sigma^3} \int d\mathbf{r} \Phi' \rho_2 R \gamma_0 \alpha_{1R} \alpha_{1R}' k_3,$$

$$o_2' = \frac{1}{kT\sigma^3} \int d\mathbf{r} \Phi' \rho_2 R \gamma_0 \alpha_{1R} \alpha_{3R}' k_1,$$

$$o_3' = \frac{1}{kT\sigma^3} \int d\mathbf{r} \Phi' \rho_2 R \gamma_0 \alpha_{3R} \alpha_{1R}' k_1,$$

$$\sum_{i=1}^4 o_i' = \frac{1}{kT\sigma^3} \int d\mathbf{r} \Phi' \rho_2 R \gamma_0 \alpha_{3R} \alpha_{3R}' k_3,$$

$$o_1 = o_1' + \frac{1}{\sqrt{mkT}\sigma^3} \int d\mathbf{r} \Phi' \rho_2 \gamma_0^2 \alpha_{1R}' \alpha_{1R}' s_0 k_3,$$

$$o_2 = o_2' + \frac{1}{\sqrt{mkT}\sigma^3} \int d\mathbf{r} \Phi' \rho_2 \gamma_0^2 \alpha_{1R}' \alpha_{3R}' s_0 k_1,$$

$$o_3 = o_3' + \frac{1}{\sqrt{mkT} \sigma^3} \int dr \Phi' \rho_2 \gamma_0^2 \alpha_{1R}' \alpha_{3R}' s_0 k_1,$$

$$\sum_{i=1}^4 o_i = \sum_{i=1}^4 o_i' + \frac{1}{\sqrt{mkT} \sigma^3} \int dr \Phi' \rho_2 \gamma_0^2 \alpha_{3R}' \alpha_{3R}' s_0 k_3.$$

Здесь σ — параметр потенциала взаимодействия молекул; $\gamma_0 = \mathbf{g}_0 \sqrt{m/2kT} = -\alpha_R' \sqrt{4E/m}$, где $E = mg^2/4 + \Phi(r) = mg_0^2/4$, так что $\Phi(R) = 0$. Таким образом, R — параметр обрезания потенциала. Векторы $\alpha_R = (\alpha_{1R}, \alpha_{2R}, \alpha_{3R}) = (\sin \beta_R \cos \varepsilon, \sin \beta_R \sin \varepsilon, \cos \beta_R)$, $\alpha_R' = (\alpha_{1R}', \alpha_{2R}', \alpha_{3R}') = (\sin \eta_R \cos \varepsilon, \sin \eta_R \sin \varepsilon, \cos \eta_R)$, $\mathbf{k} = (k_1, k_2, k_3) = (\sin \vartheta \cos \varepsilon, \sin \vartheta \sin \varepsilon, \cos \vartheta)$ характеризуют динамику парного столкновения молекул в прямоугольной системе координат (x, y, z) с осью z , направленной вдоль вектора \mathbf{g} (см. [4]). Если \mathbf{r} — некоторая точка на траектории, а \mathbf{g} — соответствующая ей скорость, то $\mathbf{r} = R\alpha$, $\mathbf{g} = g\alpha'$. Параметр s_0 определен в [4]; $\mathbf{r}_0 = R\alpha_R$, $\mathbf{g}_0 = g_0\alpha_R'$; $\mathbf{G} = (\mathbf{V}_1 + \mathbf{V}_2)/2$; $\mathbf{V}_i = \mathbf{v}_i - \mathbf{u}$. Здесь и везде ниже по повторяющимся индексам производится суммирование.

С учетом явного вида интегралов столкновения J_{i0} и дифференциального оператора уравнения (4) оно принимает вид

$$\frac{2}{m} \iint d\mathbf{r} d\mathbf{g} \frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{r}} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{g}} \chi_{f_{10}^{(0)} f_{20}^{(0)}} (\varphi_{10} + \varphi_{20}) = -\mathbf{K} \cdot \nabla \ln T - \mathbf{L} : (\nabla \mathbf{u})^s - M \nabla \cdot \mathbf{u}, \quad (4a)$$

$$K_j = f_1^{(0)} (1 + nb) \left(\frac{5}{2} - W_1^2 \right) V_{1j} - \sigma^3 \sqrt{\frac{4kT}{m}} \int \frac{\partial}{\partial g_i} \{ f_1^{(0)} f_2^{(0)} [o_1 e_i U_{1k} + o_2 e_k U_{ij} + o_3 e_j U_{ik} + o_4 e_i e_j e_k] \} G_n dv_2,$$

$$L_{jk} = -2(1 + nb) (W_{1j} W_{1k})^s f_1^{(0)} - \sigma^3 \sqrt{\frac{4kT}{m}} \int \frac{\partial}{\partial g_i} \{ f_1^{(0)} f_2^{(0)} [o_2' e_j U_{ik} + o_3' U_{ij} e_k + o_4' e_i e_j e_k - (1/3) (o_2' + o_3' + o_4') e_i U_{jk}] \} dv_2,$$

$$M = \left[(1 + nb) \left(\frac{2}{3} - \frac{k}{c_V} \right) - \frac{nkT}{c_V} \frac{\partial b}{\partial T} \right] \left(\frac{3}{2} - W_1^2 \right) f_1^{(0)} - \sigma^3 \sqrt{\frac{4kT}{m}} \int \frac{\partial}{\partial \mathbf{g}} \cdot f_1^{(0)} f_1^{(0)} \left[o_1' + \frac{1}{3} (o_2' + o_3' + o_4') \right] \mathbf{e} dv_2,$$

где $\mathbf{W} = \mathbf{V} \sqrt{m/2kT}$; $(\mathbf{W}\mathbf{A})^s$ — бездивергентный тензор второго ранга.

Решение этого уравнения строится стандартным образом и имеет вид

$$\varphi = -\mathbf{W}_1 \cdot A \nabla \ln T - (\mathbf{W}_1 \mathbf{W}_1)^s : B \nabla \mathbf{u} - C \nabla \cdot \mathbf{u}. \quad (5)$$

Функции A , B , C удовлетворяют линейным интегральным уравнениям, решения которых ищутся разложением в ряд по полиномам Сонина. В первом приближении

$$A = \left(\frac{5}{2} - W_1^2 \right) \frac{K_1}{\alpha}, \quad B = \frac{L_0}{\alpha},$$

$$C = 2 \left(\frac{15}{8} - \frac{5}{2} W_1^2 + \frac{1}{2} W_1^4 \right) \frac{M_2}{\alpha}, \quad (6)$$

$$\alpha = -8n^2 \sigma^2 \sqrt{\pi kT/m} \Omega^{(2,2)*} - n^3 \sigma^2 \sqrt{kT/m} \beta,$$

$$\beta = \frac{1}{n\sigma^3} \iint d\mathbf{r} d\boldsymbol{\gamma} \gamma \cdot \frac{\partial \chi}{\partial \mathbf{r}} \exp \left(-\frac{\Phi}{kT} - \boldsymbol{\gamma}^2 \right) (\boldsymbol{\gamma} \cdot \boldsymbol{\gamma}_0)^2, \quad \boldsymbol{\gamma} = \mathbf{g} \sqrt{\frac{m}{2kT}},$$

$$K_1 = \frac{15}{4} \sqrt{\frac{2kT}{m}} n(1 + nb) - 5n^2 \sigma^3 \sqrt{\frac{2kT}{\pi m}} \left(o_{13} + o_{23} + o_{33} + \frac{3}{5} o_{13} \right),$$

$$L_0 = -5n(1+nb) + \frac{4n^2\sigma^3}{3\sqrt{\pi}} (5o_{23}' + 5o_{33}' + 2o_{43}'),$$

$$M_2 = \frac{2n^2\sigma^3}{3\sqrt{\pi}} \left(3o_{15}' + o_{25}' + o_{35}' + o_{45}' - \frac{15}{2}o_{13}' - \frac{5}{2}o_{23}' - \frac{5}{2}o_{33}' - \frac{5}{2}o_{43}' \right),$$

$$o_{ij} = \int_0^\infty e^{-\gamma^2} o_{ij} \gamma^j d\gamma.$$

Интегралы o_{ij}' определяются аналогично; $\Omega^{(2,2)} - \Omega$ — интегралы [1].

Вычисляя с помощью функции (5) тензор напряжения и вектор потока тепла, находим выражения для коэффициентов сдвиговой η и объемной κ вязкости и теплопроводности λ

$$\eta = \frac{nkTB}{2} \left(1 - \frac{4}{15} \sqrt{\pi} n\sigma^3 N_\eta^{(1)} \right) + \frac{2n^2\sigma^4}{15} H_\eta^{(1)}, \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \kappa = & \frac{2}{9} n^2\sigma^4 \sqrt{\pi} mkT (R_k^{(1)} + H_k^{(1)}) + \frac{2n^2M_2}{3\alpha} \int dr r^3 \Phi' \frac{\Phi}{kT} \left(1 - \frac{\Phi}{kT} \right) \rho_2 - \\ & - \frac{n^2}{6kT} \left[\frac{2}{3} - \frac{(\partial p / \partial T)_v}{nc_v} \right] \int dr \Phi' \Phi s_0 \rho_2, \end{aligned} \quad (8)$$

$$\lambda = -\frac{nkK_1}{4\alpha} \sqrt{\frac{2kT}{m}} \left[5 + \frac{2\pi n}{kT} \int dr r^2 \rho_2 \left(1 - \frac{\Phi}{kT} \right) \left(\Phi' \frac{r}{3} - \Phi \right) - \right. \quad (9)$$

$$\left. - \frac{4n\sigma^3 \sqrt{\pi}}{3} (N_\lambda^{(1)} - T_\lambda^{(1)}) \right] + \frac{n^2 k\sigma^4}{3} \sqrt{\frac{\pi kT}{m}} \left(H_\lambda^{(1)} + \frac{R_\lambda^{(1)}}{2} - I_\lambda^{(1)} - i_\lambda^{(1)} \right) - \frac{n^2 kT}{m\sqrt{\pi}} P_\lambda^{(1)},$$

$$P_\lambda^{(1)} = \int d\gamma \gamma^2 \tau e^{-\gamma^2} \left(\frac{5}{2} + \gamma^2 \right) \int dr \left(\Phi' \frac{r}{3} - \Phi \right) \rho_2,$$

$$i_1^{(1)} = \frac{1}{\pi k T \sigma^4} \sqrt{\frac{kT}{m}} \int dr \Phi \rho_2 \gamma_0^2 s_0 \alpha_{1R}' \alpha_{1R}',$$

$$i_{mn}^{(1)} = \int e^{-\gamma^2} i_m^{(1)} \gamma^{(n)} d\gamma,$$

$$i_1^{(1)} + i_2^{(1)} = \frac{1}{\pi k T \sigma^4} \sqrt{\frac{kT}{m}} \int dr \Phi \rho_2 \gamma_0^2 s_0 \alpha_{3R}' \alpha_{3R}' \quad i_\lambda^{(1)} = 3i_{12}^{(1)} + i_{22}^{(1)},$$

где функции $N_\eta^{(1)}$, $H_\eta^{(1)}$, $R_k^{(1)}$, $H_k^{(1)}$, $N_\lambda^{(1)}$, $T_\lambda^{(1)}$, $H_\lambda^{(1)}$, $R_\lambda^{(1)}$, $I_\lambda^{(1)}$ получаются из соответствующих выражений работ [4, 5] заменой в подынтегральных выражениях функций $\exp(-\Phi/kT)$ на ρ_2 .

При выводе формул (7)–(9) учтены все эффекты неидеальности газа: нелокальность взаимодействия, запаздывание и многочастичные столкновения. Чтобы исключить влияние на коэффициенты переноса многочастичных столкновений, необходимо здесь положить $\chi=1$. Рассмотрим теперь приближение умеренно плотного газа. В этом случае формулы (7)–(9) существенно упрощаются. Прежде всего при вычислении интегралов N , H , R , T , I , i , P следует положить $\chi=1$, так что они будут совпадать с соответствующими функциями из [4, 5]. Кроме того, в этом приближении функции A , B и C следует разложить в ряд по n и сохранить в этом разложении первые два члена. Коэффициенты переноса умеренно плотного газа ранее выводились Снайдером и Кертиссом [4, 5] и Хоффманом и Кертиссом [6]. В первом случае при выводе коэффициентов переноса не учитывались многочастичные столкновения и эффекты запаздывания, а во втором — эффекты запаздывания. Если коэффициенты переноса Снайдера — Кертисса [4, 5] обозначить индексами «SC», то в приближении умеренно плотного газа формулы (7)–(9) сводятся к сле-

дующим:

$$\eta^{(1)} = \eta_{sc} - \frac{5}{128\pi^4} \sqrt{mkT} \frac{n\beta}{(\sigma\Omega^{(2,2)})^2} - \frac{2n^2\sigma^4}{15} \sqrt{\pi mkT} R_n, \quad (10)$$

$$(11)$$

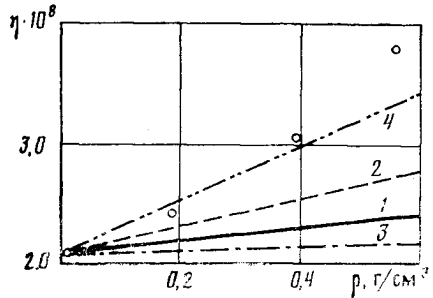
$$\lambda^{(1)} = \lambda_{sc} - \frac{75}{512} \sqrt{\frac{kT}{m}} \frac{nk\beta}{\sqrt{\pi}^5 (\sigma\Omega^{(2,2)})^2} - \frac{n^2 k \sigma^4}{3} \sqrt{\frac{\pi kT}{m}} i_\lambda - \frac{n^2 kT}{m\sqrt{\pi}} P_\lambda, \quad \kappa^{(1)} = \kappa_{sc}.$$

Приближение Хоффмана — Кертисса также получается из этих выражений, если в (10), (11) ограничиться первыми двумя членами.

Применимость полученных для коэффициентов переноса формул рассмотрим на примере коэффициента сдвиговой вязкости умеренно плотного газа. Зависимость коэффициента вязкости $\Lambda\eta$ от плотности при фиксированной температуре $T=273$ К представлена на рисунке. Кривая 1 соответствует теории Энскога [1], 2 — Снайдера — Кертисса [4, 5], 3 — Хоффмана — Кертисса [6], 4 — формулам (10), (11). Последние три кривые построены для межмолекулярного потенциала «мягких» сфер: $\Phi = 4\epsilon(\sigma/r)^{12}$. Параметры потенциалов определялись по данным о коэффициенте вязкости при нормальном давлении. Экспериментальные данные [7] на рисунке показаны точками.

Анализ приведенных на рисунке данных показывает, что теория Энскога с точностью не ниже 10% применима вплоть до давлений порядка 120 атм. Теория Снайдера — Кертисса несколько лучше и применима с той же точностью до 150 атм. Теория же Хоффмана — Кертисса, напротив, ухудшает результат Энскога. На первый взгляд, это странно, поскольку последняя теория более общая. Ничего удивительного, однако, нет, так как эта теория в одном обстоятельстве непоследовательна: в ней учтены корреляции, связанные с интерференцией эффектов памяти, но не рассмотрены собственно эффекты памяти, которые определяют вклады в коэффициенты переноса того же порядка. Отметим, что в рамках теории [6] этого не удается сделать принципиально. Кинетическое уравнение (1) свободно от такого недостатка. Теория коэффициентов переноса, основанная на использовании этого уравнения, применима вплоть до давлений порядка 300 атм.

Важным свойством любой теории является возможность предсказания ею правильной зависимости коэффициентов переноса от температуры. В частности, теория Энскога приводит к качественно неправильной зависимости первой вириальной поправки к коэффициенту вязкости при высоких температурах, где она становится отрицательной. Этот эффект является по существу термодинамическим и может быть предсказан лишь при использовании в теории реальных межмолекулярных потенциалов. Формулы (10), (11) принципиально позволяют сделать это, хотя и требуют выполнения серии расчетов интегралов H_λ , H_η и т. п. на ЭВМ. Результаты расчета коэффициентов переноса по (10), (11) для реальных потенциалов взаимодействия будут приведены в следующей работе.



Институт теоретической
и прикладной механики СО АН СССР

Поступила в редакцию
17.XII.1987

ЛИТЕРАТУРА

1. Чепмен С., Каулинг Т. Математическая теория неоднородных газов. М.: ИЛ, 1960.
2. Рудяк В. Я. // ТВТ. 1985. Т. 23, № 2. С. 268.
3. Рудяк В. Я. Статистическая теория диссипативных процессов в газах и жидкостях. Новосибирск: Наука, 1987. 270 с.
4. Snider R. F., Curtiss C. F. // Phys. Fluids. 1958. V. 1. N 2. P. 122.
5. Snider R. F., McCourt F. R. // Phys. Fluids. 1963. V. 6. N 7. P. 1020.
6. Hoffman D. K., Curtiss C. F. // Phys. Fluids. 1965. V. 8. N 4. P. 667.
7. Michels A., Botzen A., Schuurman W. // Physica. 1954. V. 20. N 10. P. 1141.