ПМТФ, № 5, 1974

УДК 533.6.011.8

# ТЕЧЕНИЕ БИНАРНОЙ СМЕСИ ГАЗОВ ПРИ ПРОИЗВОЛЬНОЙ АККОМОДАЦИИ ТАНГЕНЦИАЛЬНОГО ИМПУЛЬСА

*Н. Д. Почуев, В. Д. Селезнев, П. Е. Суетин*

(*Свердловск*)

Методом Бубнова — Галеркина решена система уравнений БГК (Бхатнагара, Гросса, Крука), описывающих изотермическое течение бинарной смеси газов в капилляре при произвольной аккомодации тангенциального импульса. Даны общие выражения для кинетических термодинамических коэффициентов, справедливые во всем диапазоне чисел Кнудсена, которые имеют корректные свободномолекулярный и вязкий пределы. Вычисленные с использованием опытных значений доли диффузного отражения коэффициенты диффузионного скольжения сравниваются с экспериментальными данными.

В динамике разреженного газа существует ряд явлений, таких как диффузиофорез, разделение смеси при течении, которые даже в пределе вязкого режима не могут быть описаны классической газодинамикой, основанной на решении уравнения Больцмана методами Чепмена — Энскога или Греда. Только решение уравнения Больцмана и его моделей с постановкой граничных условий для функции распределения позволяет получать закономерности этих явлений.

В данной работе с этой точки зрения рассмотрен вопрос о влиянии взаимодействия молекул газа с поверхностью на потоки, вызываемые неоднородностями давления и концентрации бинарной смеси газов в капилляре при произвольных разрежениях. Обобщенные термодинамические потоки, как функции числа Кнудсена Kn, определены из решения системы модельных уравнений БГК с максвелловскими граничными условиями. В пределе вязкого режима кинетические коэффициенты, описывающие течение Пуазейля и взаимную диффузию, не зависят от деталей взаимодействия молекул газа с поверхностью, в то время как перекрестные коэффициенты (постоянная бародиффузии и коэффициент диффузионного скольжения) в существенной мере определяются этим взаимодействием.

Рассмотрим изотермическое течение бинарной смеси газов в длинном капилляре радиуса $R$. Градиенты плотности первого и второго компонентов малы и направлены вдоль оси $z$. Течение смеси описывается системой уравнений БГК

$$(1)\qquad \begin{aligned} \mathbf{v}_i \nabla f_i &= \nu_{ii}(M_i - f_i) + \nu_{ij}(M_{ij} - f_i) \\ \mathbf{v}_j \nabla f_j &= \nu_{jj}(M_j - f_j) + \nu_{ji}(M_{ji} - f_j) \end{aligned}$$

где $M_i$, $M_{ij}$ — линейные разложения локально-максвелловских функций распределения, $\mathbf{v}_i\,(v_{iz},\ v_{ir},\ v_{i\varphi})$ — вектор скорости молекулы $i$-го компонента, $\nu_{ij}$, $\nu_{ii}$ — частоты перекрестных самостолкновений, $f_i$ — функция распределения молекул $i$-го компонента.

Граничные условия для функции распределения выберем в виде

$$(2)\qquad f_i\,(v_{iz},\ v_{ir},\ v_{i\varphi}) = \varepsilon_i M_i + (1 - \varepsilon_i)\, f_i\,(v_{iz}, -v_{ir},\ v_{i\varphi})$$

где $\varepsilon_i$ — доля молекул, отраженных от стенки диффузно.

Обобщая результаты работ [1, 2], можно получить интегрированием вдоль характеристик системы (1) с использованием условия (2) следующую систему интегральных уравнений для скоростей компонентов:

$$u_{iz}(r) = \frac{1}{2\pi}\int\limits_0^\infty\int\limits_0^{2\pi}\left\{\left[1-(1-\varepsilon_i)\exp\left(-\frac{\nu_i l}{v_i}\right)\right]^{-1}(1-\varepsilon_i)\int\limits_0^l \times\right. \tag{3}$$

$$\times \exp\left[-\frac{\nu_i(l+\xi-\xi')}{v_i}\right]\Lambda_i(r')\,d\xi' + \left.\int\limits_0^\xi \exp\left[-\frac{\nu_i(\xi-\xi')}{v_i}\right]\Lambda_i(r')\,d\xi'\right\}\times$$

$$\times \exp\left[-\frac{m_i v_i^2}{2kT}\right]dv_i\,d\varphi$$

$$\Lambda_i(r) = \frac{m_i}{kT}\left[u_{iz}(1-\alpha_i) + u_{jz}\alpha_i - \frac{k_i}{\nu_i}\frac{kT}{m_i}\right]$$

$$\alpha_i = \delta\frac{m_j}{m_0}\frac{\nu_{ij}}{\nu_{ii}+\nu_{ij}}, \quad k_i = -\frac{1}{n_i}\frac{\partial n_i}{\partial z}, \quad m_0 = m_i + m_j$$

$$l = 2\sqrt{R^2 - r^2\sin^2\varphi}, \quad \xi = l/2 + r\cos\varphi$$

$$r' = [R^2 + \xi'^2 - 2\xi' l]^{1/2}, \quad \nu_i = \nu_{ii} + \nu_{ij}$$

Здесь $m_i$ — масса молекулы $i$-го компонента, $T$ — абсолютная температура, $\delta$ — параметр перекрестных столкновений (обычно $\delta = {}^5/_3$), $n_i$ — плотность числа молекул $i$-го компонента.

Аналогичное уравнение для $j$-го компонента получается взаимной заменой индексов $i \rightleftarrows j$.

Система уравнений (3) решается методом Бубнова — Галеркина с квадратичной пробной функцией. Результат решения удобно представить в виде выражений для термодинамических кинетических коэффициентов, которые могут быть экспериментально измерены. Согласно термодинамике необратимых процессов обобщенные потоки, соответствующие обобщенным силам $X_1 = \partial p/\partial z$ и $X_2 = p\partial c_i/\partial z$ запишутся следующим образом:

$$J_1 = c_i\langle u_{iz}\rangle + c_j\langle u_{jz}\rangle = -L_{11}X_1 - L_{12}X_2 \tag{4}$$

$$J_2 = \langle u_{iz}\rangle - \langle u_{jz}\rangle = -L_{21}X_1 - L_{22}X_2 \tag{5}$$

где $L_{11}$, $L_{12}$, $L_{21}$, $L_{22}$ — кинетические коэффициенты, $\langle u_{iz}\rangle$ — средняя по сечению капилляра скорость $i$-го компонента

$$c_i = n_i/n, \quad n = n_i + n_j, \quad p = nkT$$

Решение системы уравнений (3) позволяет найти кинетические коэффициенты, введенные согласно (4) и (5)

$$L_{11} = (n_j m_j \nu_j \alpha_j \Delta)^{-1}\left\{-\pi[\alpha_j\beta_i\gamma_j(\alpha_i - c_j)^2 + \alpha_i\beta_j\gamma_i(\alpha_j - c_i)^2] +\right. \tag{6}$$

$$+ \pi^2\alpha_i\alpha_j[(\alpha_i - c_j)\gamma_i'\gamma_j + (\alpha_j - c_i)\gamma_j'\gamma_i] + \frac{\pi^3}{12}\alpha_i\alpha_j(\alpha_i\gamma_j + \alpha_j\gamma_i) +$$

$$+ \frac{\pi^2}{12}[\beta_i\alpha_j^2(c_j^2 - \alpha_i) + \beta_j\alpha_i^2(c_i^2 - \alpha_j)] - \frac{\pi^2}{12}\alpha_i\alpha_j(\varkappa_i + \varkappa_j)c_i c_i -$$

$$\left. - [c_j\alpha_j(\alpha_i - c_j) + c_i\alpha_i(\alpha_j - c_i)][\theta\beta_i\beta_j + \pi(\alpha_i\beta_j\gamma_i' + \alpha_j\beta_i\gamma_j')]\right\}$$

$$L_{21} = L_{12} = (n_j m_j \nu_j \alpha_j \Delta)^{-1}\left[\theta\beta_i\beta_j(c_i\alpha_i - c_j\alpha_j) + \pi^2\alpha_i\alpha_j(\gamma_i'\gamma_j - \gamma_i\gamma_j') +\right. \tag{7}$$

$$+ \pi\theta(\alpha_j\beta_i\gamma_j c_j - \alpha_i\beta_j\gamma_i c_i) - \frac{\pi}{12}(c_i\alpha_i - c_j\alpha_j)(\alpha_j\beta_i C_{22}^j + \alpha_i\beta_j C_{22}^i) +$$

$$\left. + \frac{\pi^2}{12}(\alpha_i^2\beta_j c_i - \alpha_j^2\beta_i c_j) + \frac{\pi^2}{12}\alpha_i\alpha_j(\varkappa_i c_i - \varkappa_j c_j)\right]$$

(8)
$$L_{22} = \frac{D_{ij}}{c_i c_j p}\left\{1 - \frac{\theta\beta_i\beta_j}{\Delta} + \frac{\pi}{12\Delta}(\beta_i\alpha_j C_{22}^j + \beta_j\alpha_i C_{22}^i)\right\}$$

$$\gamma_i = C_{12}^i - C_{11}^i - {}^1/_4 C_{22}^i, \quad \gamma_i' = \gamma_i - {}^1/_{12} C_{22}^i$$

$$\beta_i = (C_{12}{}^i)^2 - C_{11}{}^i C_{22}{}^i, \qquad \delta_i = \sqrt{\frac{m_i}{2kT}}\,\nu_i R$$

$$\varkappa_i = C_{22}{}^i\,({}^1/_2 C_{12}{}^j - C_{11}{}^j) - C_{12}{}^i\,({}^1/_2 C_{22}{}^j - C_{12}{}^j)$$

$$\Delta = \theta^2\beta_i\beta_j + \pi\alpha_i\theta\beta_j\gamma_i' + \pi\alpha_j\theta\beta_i\gamma_j' - \frac{\pi^2}{12}\alpha_i\alpha_j(\varkappa_i + \varkappa_j) - \frac{\pi^2}{12}(\alpha_i^2\beta_j + \alpha_j^2\beta_i)$$

(9)
$$C_{11}{}^i = \frac{8\sqrt{\pi}}{3\delta_i^4}\frac{2-\varepsilon_i}{\varepsilon_i} + \frac{\pi(1-2\varepsilon_i)}{\delta_i^2} + \frac{8\pi}{\delta_i^4}(1-\varepsilon_i) +$$
$$+ \sum_{k=1}^{\infty}(1-\varepsilon_i)^{k-1}\left\{8I_1{}^{\circ}(k\delta_i)\left[\varepsilon_i^2 k - \frac{8}{3}\varepsilon_i(2-\varepsilon_i)k^2 + \frac{4\varepsilon_i k}{\delta_i^2} -\right.\right.$$
$$- \frac{2\varepsilon_i(2-\varepsilon_i)}{\delta_i^2} - \frac{16}{3}\frac{(2-\varepsilon_i)\varepsilon_i k^2}{\delta_i^2} + \frac{2(2-\varepsilon_i)^2 k}{\delta_i^2} - \frac{8\varepsilon_i^2 k^3}{3\delta_i^2} +$$
$$\left. + \frac{8\varepsilon_i^2 k}{\delta_i^4} - \frac{8\varepsilon_i(2-\varepsilon_i)}{\delta_i^4}\right] + 16 I_0{}^1(k\delta_i)\left[\frac{2\varepsilon_i^2 k^2}{\delta_i} - \frac{\varepsilon_i(2-\varepsilon_i)k}{\delta_i} +\right.$$
$$\left. + \frac{2(2-\varepsilon_i)^2 k^2}{\delta_i} + \frac{4\varepsilon_i^2 k^2}{\delta_i^3} - \frac{4\varepsilon_i(2-\varepsilon_i)k}{\delta_i^3}\right] + 32 I_1{}^2(k\delta_i)\,\times$$
$$\left.\times\left[\frac{2}{3}\varepsilon_i(2-\varepsilon_i)k^2 + \frac{10}{3}\frac{\varepsilon_i(2-\varepsilon_i)k^2}{\delta_i^2} + \frac{(2-\varepsilon_i)^2 k}{\delta_i^2} + \frac{2}{3}\frac{\varepsilon_i^2 k^3}{\delta_i^2}\right]\right\}$$

(10)
$$C_{12}{}^i = \frac{4\sqrt{\pi}}{3\delta_i}\frac{2-\varepsilon_i}{\varepsilon_i} - \frac{\pi\varepsilon_i}{\delta_i^2} - 8\varepsilon_i\sum_{k=1}^{\infty}(1-\varepsilon_i)^{k-1}\left\{I_1{}^{\circ}(k\delta_i)\left[\frac{2-\varepsilon_i}{\delta_i^2} -\right.\right.$$
$$\left. - \varepsilon_i k - \frac{2\varepsilon_i k}{\delta_i^2} + \frac{4(2-\varepsilon_i)k^2}{3}\right] - \frac{4(2-\varepsilon_i)k^2}{3}I_1{}^2(k\delta_i) +$$
$$\left. + I_0{}^1(k\delta_i)\left[\frac{(2-\varepsilon_i)k}{\delta_i} - \frac{2\varepsilon_i k^2}{\delta_i}\right]\right\}$$

(11)
$$C_{22}{}^i = 8\varepsilon_i^2\sum_{k=1}^{\infty}(1-\varepsilon_i)^{k-1} k I_1{}^{\circ}(k\delta_i)$$

$$I_n{}^m(\delta) = \int_0^1\int_0^{\infty} x^m\sqrt{1-x^2}\,y^n\exp\left(-y^2 - \frac{2\delta x}{y}\right)dx\,dy$$

Эти термодинамические коэффициенты описывают соответственно течение Пуазейля ($L_{11}$), диффузионное скольжение ($L_{12}$), бародиффузию ($L_{21}$) и взаимную диффузию ($L_{22}$) при любом разрежении. При произвольной аккомодации тангенциального импульса сохраняется равенство перекрестных кинетических коэффициентов, доказанное в работе [1] для полностью диффузного отражения молекул стенками капилляра.

В свободномолекулярном пределе выражения (9) — (11) могут быть точно просуммированы и коэффициенты $L_{11}$, $L_{12}$, $L_{21}$, $L_{22}$ принимают вид

$$L_{11} = \frac{2}{3}\frac{R}{p}\left(c_i v_{ti}\frac{2-\varepsilon_i}{\varepsilon_i} + c_j v_{tj}\frac{2-\varepsilon_j}{\varepsilon_j}\right)$$

$$L_{22} = \frac{2}{3}\frac{R}{p}\left(\frac{v_{ti}}{c_i}\frac{2-\varepsilon_i}{\varepsilon_i} + \frac{v_{tj}}{c_j}\frac{2-\varepsilon_j}{\varepsilon_j}\right)$$

$$L_{12} = \frac{2}{3}\frac{R}{p}\left(v_{ti}\frac{2-\varepsilon_i}{\varepsilon_i} - v_{tj}\frac{2-\varepsilon_j}{\varepsilon_j}\right)$$

где $v_{ti} = (8\,kT\,/\,\pi\,m_i)^{1/2}$ — средняя тепловая скорость молекул. Эти выражения совпадают с результатами, выведенными из элементарной формулы Кнудсена для свободномолекулярного течения газа.

При рассмотрении поставленной задачи представляет интерес вязкий предел общего решения, так как он дает границы применимости чепмен-энскоговской процедуры решения проблемы. Полагая в выражениях (6) — (8), что обратные числа Кнудсена $\delta_i$, $\delta_j \to \infty$, получим

$$L_{11} = \frac{R^2}{8\eta} + \frac{\alpha_i}{n_j m_j \nu_j}\left\{\frac{\sqrt{\pi}\,\delta_i\delta_j}{\alpha_i\delta_i\varepsilon_j + \alpha_j\delta_j\varepsilon_i} + \frac{\delta_i\delta_j\,[\alpha_i\delta_i^3(2-\varepsilon_j) + \alpha_j\delta_j^2(2-\varepsilon_i)]}{\sqrt{\pi}\,(\alpha_j\delta_j^2 + \alpha_i\delta_i^2)^2} - \right.$$
$$\left. - \frac{\sqrt{\pi}\,\delta_i\delta_j\,(\alpha_i\delta_i^2\varepsilon_j + \alpha_j\delta_j^2\varepsilon_i)\,[\alpha_i\delta_i^2(4-\varepsilon_j) + \alpha_j\delta_j^2(4-\varepsilon_i)]}{4\,(\alpha_i\delta_i^2 + \alpha_j\delta_j^2)\,(\alpha_i\delta_i\varepsilon_j + \alpha_j\delta_j\varepsilon_i)}\right\} \tag{12}$$

$$L_{22} = \frac{D_{ij}}{pc_ic_j}\left[1 - \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{\alpha_i\delta_i}{\varepsilon_i} + \frac{\alpha_j\delta_j}{\varepsilon_j}\right)^{-1}\right] \tag{13}$$

$$L_{12} = \frac{\sigma D_{ij}}{p}, \qquad L_{21} = \frac{\alpha_p D_{ij}}{p} \tag{14}$$

$$\alpha_p = \sigma = \frac{\varepsilon_j\sqrt{m_j}\,\nu_j\,(c_i - \varepsilon_i/2) - \varepsilon_i\sqrt{m_i}\,\nu_i\,(c_j - \varepsilon_j/2)}{(c_i\nu_j + c_j\nu_i)\,(c_j\varepsilon_j\sqrt{m_j} + c_i\varepsilon_i\sqrt{m_i})} +$$
$$+ \frac{c_j\varepsilon_j\sqrt{m_j}\,\nu_i - c_i\varepsilon_i\sqrt{m_i}\,\nu_j}{(c_i\nu_j + c_j\nu_i)\,(c_j\varepsilon_j\sqrt{m_j} + c_i\varepsilon_i\sqrt{m_i})} \tag{15}$$

где $\alpha_p$ — постоянная бародиффузии, $\sigma$ — коэффициент диффузионного скольжения, $D_{ij} = kTm_0c_j\,/\,m_im_j\delta\nu_{ij}$ — коэффициент взаимной диффузии, $\eta = p\,[c_j\,/\,\nu_j + c_i\,/\,\nu_i]$ — вязкость смеси.

Все кинетические коэффициенты в режиме со скольжением имеют поправочный член, пропорциональный числу Кнудсена (Kn). Для перекрестных коэффициентов поправочный член не приведен ввиду громоздкости.

Сравнение с классическим решением уравнения Больцмана показывает, что коэффициенты $L_{11}$ и $L_{22}$ такие же, а перекрестный коэффициент $L_{21} = L_{12}$ отличается принципиально от полученного методом Греда [3] наличием зависимости от деталей взаимодействия со стенками канала.

Возможность такой зависимости в пределе вязкого режима связана с тем, что в характерные диффузионные скорости дает вклад вязкое скольжение второго порядкамалости ($\sim$ Kn$^2$), которое сравнимо по величине с диффузионными скоростями и различно для разных компонентов. Скорость смешения газов, которая характеризуется коэффициентом взаимной диффузии, не зависит ни от частоты столкновений одноименных молекул, ни от деталей взаимодействия молекул со стенками капилляра, а полностью определяется частотой перекрестных столкновений.

Влияние неполной аккомодации тангенциального импульса сказывается на коэффициенте $L_{22}$ только в режиме со скольжением, причем вид этой зависимости позволяет извлекать информацию о взаимодействии молекул с поверхностью из экспериментальных данных по диффузии в разреженных газах.

Из формулы (15) следует, что разделение смеси и диффузионный бароэффект в вязком режиме будут иметь место даже в смеси, молекулы компонентов которой будут отличаться только коэффициентами аккомодации тангенциального импульса. В таблице сравниваются коэффициенты диффузионного скольжения $\sigma$, рассчитанные по (15), с экспериментальными данными различных авторов. Необходимые для вычисления коэффициенты аккомодации тангенциального импульса взяты из работы [6], где они были определены из опытов по течению Пуазейля.

**Коэффициенты диффузионного скольжения σ**

| | He—Ar | $H_2$—$D_2$ | $H_2$—Ar | $H_2$—He | He—Ne | Ne—Ar | $H_2$—Ne | Ar—$CO_2$ | He—$D_2$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| σ (15) | 0.607 | 0.265 | 0.898 | 0.340 | 0.519 | 0.143 | 0.875 | —0.0727 | —0.0541 |
| σ ($\varepsilon_i = \varepsilon_j = 1$) | 0.555 | 0.260 | 0.944 | 0.374 | 0.514 | 0.0823 | 0.905 | —0.0807 | —0.0925 |
| Эксперимен-тальное σ | 1.04 [4] | 0.334 [4] | 1.36 [4] | 0.46 [4] | 0.74 [4] | 0.34 [4] | 1.22 [4] | —0.026 [5] | —0.063 [5] |

Совпадение экспериментальных и рассчитанных коэффициентов качественно удовлетворительное. Вычисленные значения, как правило, занижены. Учет неполной аккомодации сближает экспериментальные и теоретические данные. Особенно чувствительны к деталям взаимодействия молекул с поверхностью пары газов с близкими массами и большой долей зеркального отражения.

Поступила 22 I 1974

ЛИТЕРАТУРА

1. *Селезнев В. Д.*, *Суетин П. Е.* Диффузионный бароэффект в капилляре в широком диапазоне чисел Кнудсена. ПМТФ, 1973, № 2.
2. *Suetin P. E.*, *Porodnov B. T.*, *Chernjak V. G.*, *Borisov S. F.* Poiseuille flow at arbitrary Knudsen numbers and tangential momentum accomodation. J. Fluid Mech., 1973, vol. 60, pt 3.
3. *Жданов В.*, *Каган Ю.*, *Сазыкин А.* Влияние вязкого переноса импульса на диффузию в газовой смеси. ЖЭТФ, 1962, т. 42, вып. 3.
4. *Суетин П. Е.* Молекулярная диффузия в разреженных газах. Докт. дисс., Свердловск, 1969.
5. *Waldman L.*, *Schmitt K. H.* Über das bei der Gasdiffusion auftretende Druckgefalle. Z. Naturforsh., 1961, Bd 16a, H. 12.
6. *Борисов С. Ф.* Экспериментальное исследование изотермического и неизотермического течения разреженных газов. Канд. дисс., Свердловск, 1973.