

**В.М. Жданов, В.С. Галкин,
О.А. Гордеев, И.А. Соколова**

**ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ
В ГАЗОВОЙ ДИНАМИКЕ**

справочник

ТОМ ТРЕТИЙ

**МОДЕЛИ ПРОЦЕССОВ
МОЛЕКУЛЯРНОГО ПЕРЕНОСА
В ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКОЙ ГАЗОДИНАМИКЕ**

Под редакцией С.А. Лосева



**МОСКВА
ФИЗМАТЛИТ®
2013**

УДК 531.19+533.7
ББК 22.317+22.36
Ф 50



Издание осуществлено при поддержке
Российского фонда фундаментальных
исследований по проекту 09-01-07114

Авторский коллектив:

Жданов В.М., Галкин В.С., Гордеев О.А., Соколова И.А.

Физико-химические процессы в газовой динамике. Справочник. Т. 3. Модели процессов молекулярного переноса в физико-химической газодинамике / Под редакцией С.А. Лосева. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2012. — 284 с. — ISBN 978-5-9221-1158-4.

Третий том справочника «Физико-химические процессы в газовой динамике» содержит информацию о моделях процессов молекулярного переноса в газах и плазме. Приводятся уравнения баланса плотности числа частиц, массы, импульса, энергии, энтропии в газах и плазме, термическое и калористическое уравнения состояния, а также замыкающие систему уравнений линейные соотношения переноса. Изложены методы решения кинетического уравнения Больцмана — метод Чепмена–Энскога и моментный метод Грэда. Приводятся выражения для коэффициентов переноса в газах и их смесях, получаемые в различных приближениях Чепмена–Каулинга. Для ряда модельных потенциалов взаимодействия даны формулы, позволяющие вычислять входящие в выражения для коэффициентов переноса Ω -интегралы. Библиотека моделей коэффициентов переноса содержит приближенные формулы для их вычисления. Представлены различные методы описания переносных свойств молекулярных возбужденных газов. Изложены одножидкостная и многожидкостные многотемпературные модели плазмы. Приведены выражения для коэффициентов переноса в слабоионизированной и полностью ионизированной плазме.

Авторы материалов по описанию отдельных моделей и разделов: Е.А. Нагнибеда, Е.В. Кустова.

Рецензенты: чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н., проф. У.Г. Пирумов, д.т.н., проф. Е.В. Самуйлов.

Табл. 19. Библиогр. 242 назв.

- © ФИЗМАТЛИТ, 2012
- © Научно-исследовательский институт механики МГУ, 2012
- © Московский инженерно-физический институт, 2012
- © Центральный аэрогидродинамический институт, 2012
- © Московский авиационный институт, 2012
- © Институт математического моделирования РАН, 2012

ISBN 978-5-9221-1158-4

ОГЛАВЛЕНИЕ

От редактора	6
Предисловие	7
Введение	10
1. Основные понятия	10
2. Основные обозначения	12
3. Основные определения	15
4. Математические операции	18
Список литературы к введению	20
Глава 1. Уравнения баланса для многокомпонентной среды	21
1.1. Общие уравнения баланса	21
1.2. Уравнения неразрывности	22
1.3. Уравнение сохранения массы химических элементов	24
1.4. Уравнение баланса импульса	25
1.5. Уравнения баланса энергии	26
1.6. Уравнение баланса энтропии	28
1.7. Уравнения баланса для многокомпонентного ионизованного газа (плазмы)	29
1.8. Эквивалентная форма записи уравнений баланса импульса и энергии плазмы	31
Список литературы к главе 1	32
Глава 2. Термодинамика необратимых процессов и уравнения газодинамики	33
2.1. Термодинамика необратимых процессов	33
2.2. Уравнения газодинамики	39
Список литературы к главе 2	48
Глава 3. Уравнения переноса в кинетической теории газов	50
3.1. Смесь атомарных газов	50
3.2. Смеси молекулярных газов при учете внутренних степеней свободы молекул и химических реакций	54
Список литературы к главе 3	59
Глава 4. Соотношения переноса в газах при слабом отклонении от локального равновесия (методы Чепмена–Энскога и Грэда)	60
4.1. Метод Чепмена–Энскога	61
4.2. Метод Грэда	88
Список литературы к главе 4	99
Глава 5. Коэффициенты переноса атомарных и молекулярных газов и газовых смесей	102
5.1. Однокомпонентный атомарный газ	102

5.2. Однокомпонентный молекулярный газ	106
5.3. Смесь атомарных газов	109
5.4. Смесь молекулярных газов	119
5.5. Интегральные скобки, записанные через интегралы $\Omega^{(l,s)}$	124
Список литературы к главе 5	125
Глава 6. Транспортные сечения и Ω-интегралы для ряда модельных потенциалов парного взаимодействия частиц	127
6.1. Взаимодействие нейтральных частиц	130
6.2. Взаимодействие заряженных частиц с нейтральными частицами . .	138
6.3. Взаимодействие заряженных частиц	144
6.4. Интегралы столкновений и Ω -интегралы для столкновений электронов и атомов с атомами и молекулами атмосферных газов	148
Список литературы к главе 6	154
Глава 7. Библиотека коэффициентов переноса для различных потенциалов взаимодействия	157
7.1. Коэффициент вязкости	157
7.2. Коэффициент объемной вязкости	167
7.3. Коэффициент диффузии бинарной смеси и коэффициент самодиффузии	168
7.4. Коэффициент теплопроводности и фактор Эйкена	171
Список литературы к главе 7	179
Глава 8. Феноменологические модели в физико-химической газодинамике	180
8.1. Общие уравнения физико-химической газодинамики — модель уровневой кинетики	181
8.2. Приближенные соотношения для переносных свойств	184
8.3. Конкретные виды уравнений физико-химической газодинамики . .	188
8.4. Модели с релаксацией вращательной и колебательной энергии . .	196
Список литературы к главе 8	199
Глава 9. Переносные свойства газов при сильном отклонении от локального равновесия	201
9.1. Обобщенный метод Чепмена–Энскога	201
9.2. Модифицированный метод Чепмена–Энскога и его применения . .	216
Список литературы к главе 9	232
Глава 10. Приближенные выражения для переносных свойств при различных отклонениях от локального равновесия по внутренним степеням свободы	234
10.1. Неравновесное приближение Гиршфельдера–Эйкена	234
10.2. Переносные свойства газов с возбуждением различных внутренних степеней свободы (частные случаи)	239

10.3. Выражения для переносных свойств с учетом неупругих столкновений с вращательными обменами	245
Список литературы к главе 10	250
Глава 11. Процессы переноса в плазме	252
11.1. Одножидкостная модель плазмы	252
11.2. Многотемпературная одножидкостная модель плазмы	254
11.3. Многожидкостная модель плазмы	256
11.4. Уравнения переноса в квазигидродинамическом приближении	258
11.5. Уравнения переноса в плазме в приближении 13 моментов метода Грэда	262
11.6. Линейные соотношения переноса в высших приближениях метода моментов	266
Список литературы к главе 11	268
Глава 12. Коэффициенты переноса в слабоионизованном газе и в плазме	270
12.1. Коэффициенты переноса плазмы в произвольном приближении по числу полиномов Сонина	270
12.2. Свойства переноса электронов в произвольном приближении по числу полиномов Сонина	274
12.3. Свойства переноса электронного компонента в слабоионизованной плазме (модель лорентцева газа)	276
12.4. Коэффициенты переноса в полностью ионизованной плазме	278
Список литературы к главе 12	282

От редактора

Физико-химическая газовая динамика — стремительно развивающаяся область науки, находящая применение при решении актуальных задач энергетики и двигателестроения, химической и лазерной технологии, плазмохимии и аэрономии, авиации и ракетно-космической техники, а также экологии — защиты окружающей среды от вредных выбросов в атмосферу. Для решения этих задач необходимо использовать различные модели вычисления кинетических коэффициентов и различные модели протекающих при этом процессов. Систематизированная информация о моделях динамики физико-химических процессов в газе и плазме и о физико-химической кинетике и термодинамике представлена в двух опубликованных томах справочника «Физико-химические процессы в газовой динамике. Т. 1. Динамика физико-химических процессов в газе и плазме. Т. 2. Физико-химическая кинетика и термодинамика», где не рассматривались процессы молекулярного переноса, необходимые при описании течений вязкого газа. Содержание настоящего тома составляют модели процессов молекулярного переноса в физико-химической газодинамике. Приводится описание этих моделей, кратко указываются назначение модели, принятые допущения и существующие ограничения. Далее записываются аналитические формулы и соотношения для определяемых величин. Вслед за формулами и соотношениями для определяемых величин приводятся обозначения конкретных коэффициентов и параметров, фигурирующих в формулах. Затем следует краткое описание коэффициентов и параметров, приводятся примеры результатов расчета и характерные значения моделируемых величин, отмечается возможная погрешность и излагаются комментарии.

Гл. 1, 2, 5, 7, 11 и 12, а также разд. 4.2 написаны В. М. Ждановым. Гл. 3, 8, 9 и 10, а также разд. 4.1 написаны В. С. Галкиным. Пункт 5.4.2 написан О. А. Гордеевым. Гл. 6 написана В. М. Ждановым и О. А. Гордеевым. В гл. 6 и 7 использованы опубликованные работы безвременно скончавшейся Ирины Алексеевны Соколовой. Авторы признательны Е. А. Нагнибеда и Е. В. Кустовой за представление ими материалов, использованных в гл. 9. Научное редактирование выполнено О. А. Гордеевым и С. А. Лосевым.

Авторы и редакторы тома надеются, что он будет полезен инженерам и научным сотрудникам, студентам, аспирантам и преподавателям, для которых представляет интерес физико-химическая газодинамика и ее применение.

С. А. Лосев

Предисловие

Физико-химическая газодинамика является разделом механики сплошной среды, в котором исследуются течения нейтральных либо ионизованных газов, в которых происходят разнообразные физико-химические процессы, отличающиеся различной степенью неравновесности. Важное значение имеет при этом учет необратимого переноса массы, импульса и энергии в газе, которые соответствуют явлениям *диффузии, вязкости и теплопроводности*. В частично ионизованном газе и плазме к ним добавляется перенос заряда. Все эти явления объединяются под общим названием *процессы молекулярного переноса*.

Процессы молекулярного переноса происходят в неоднородных газах, газовых смесях и плазме, когда гидродинамическая скорость, температура и концентрация компонентов меняются от точки к точке. Для слабо неравновесных состояний газа и плазмы, вызванных неоднородностью их параметров, оказываются справедливыми линейные соотношения переноса, связывающие потоки массы, импульса и энергии с градиентами основных макроскопических переменных и внешними силами. Использование этих соотношений (свойств переноса) позволяет замкнуть классические уравнения газовой динамики — *уравнения Навье–Стокса–Фурье*.

Для течений высокотемпературных газов и плазмы вид соотношений переноса и входящих в них кинетических коэффициентов заметно усложняется, что связано с возбуждением внутренних степеней свободы молекул, протеканием химических реакций, ионизацией газа, установлением квазиравновесных состояний плазмы с различными температурами компонентов и т. д. Особое значение приобретает моделирование газодинамических процессов в потоках многоатомных реагирующих газов при сильных отклонениях от термического и химического равновесия, которое требует либо введения понятия заселенностей возбужденных уровней энергии молекул, либо введения наряду с поступательной температурой газа также и вращательной и колебательной температур.

В общей системе газодинамических уравнений возникают при этом дополнительные уравнения баланса релаксационного типа. Аналогичная ситуация имеет место при сильном различии масс частиц, образующих компоненты газовой смеси. При этом возникает необходимость введения в качестве исходных параметров разных температур и скоростей компонентов смеси (вместо единой средней температуры и средне-массовой скорости смеси) и, следовательно, введения в общую систему уравнений газодинамики уравнений релаксации для разностей температур и скоростей. Типичным примером является двухтемпературная плазма, в которой температура электронов может заметно отличаться от температуры тяжелых частиц (ионов и атомов). Возможны также

различные многожидкостные модели, в которых учитывается заметное отличие макроскопических скоростей компонентов плазмы.

Настоящий том посвящен описанию существующих моделей процессов молекулярного переноса в ламинарных однофазных потоках газов и плазмы при учете упругих и неупругих столкновений составляющих их частиц. Принципиальной особенностью обсуждаемых моделей является то, что структура выражений, входящих в уравнения переноса, во многих случаях определяется конкретными условиями разветвения физико-химических процессов. Например, при гиперзвуковом обтекании сферы в окрестности критической точки эти процессы близки к локально-равновесным, а вне окрестности происходит релаксация некоторых параметров к равновесию с конечными временами релаксации. Соответственно меняется и система уравнений физико-химической газодинамики.

Область применимости приводимых ниже соотношений ограничена областью давлений и температур, когда газ и плазму можно считать идеальными, при этом остаются в стороне вопросы переноса излучения в высокотемпературных газах и плазме. Для практического использования газодинамических моделей необходимо дополнить систему уравнений газодинамики соответствующими граничными условиями и источниками слагаемыми уравнений баланса. К последним относится, в частности, учет членов, связанных с воздействиями внешних сил (например, электрических и магнитных, что оказывается особенно важным в случае плазмы). В настоящем томе граничные условия не рассматриваются, внешние поля считаются не очень сильными. Остальные источники (типа скоростей химических реакций) предполагаются заданными.

Описание моделей, представленных в настоящем томе, включает как вывод уравнений баланса (или уравнений сохранения) для газовой смеси и плазмы, так и соотношений переноса, замыкающих эти уравнения. Феноменологическому выводу уравнений газодинамики в случае слабого отклонения от равновесия по поступательным и внутренним степеням свободы молекул посвящены главы 1 и 2. В главе 3 уравнения сохранения для многокомпонентной газовой смеси одноатомных и многоатомных молекул обосновываются на кинетическом уровне с использованием кинетического уравнения Больцмана и модифицированного кинетического уравнения Ван-Чанга и Уленбека.

Основная часть тома (гл. 4–7, 11, 12) посвящена изложению результатов молекулярно-кинетической теории газа и плазмы, получаемых на основе применения приближенных методов решения соответствующих кинетических уравнений (метод Чепмена–Энскога и метод Грэда). Эти результаты включают как линейные соотношения переноса, так и соответствующие коэффициенты переноса (кинетические коэффициенты), вычисляемые на основе законов межмолекулярного взаимодействия. По сравнению с известными монографиями по явлениям переноса в газовых смесях газов в книге большое внимание уделено соотноше-

ниям переноса для векторных величин (диффузии, термодиффузии и теплопроводности), записываемых в представлении Стефана–Максвелла, что имеет ряд практических преимуществ при их конкретных применениях в задачах газодинамики. Окончательная сводка пригодных для практических расчетов выражений для коэффициентов переноса в газах и газовых смесях приведена в гл. 7.

В реальных газах, состоящих из двухатомных и многоатомных молекул, времена релаксации энергии внутренних степеней свободы частиц могут сильно отличаться от времени поступательной релаксации, резко различаться друг от друга и кардинально меняться в поле течения. Учет этих обстоятельств приводит к изменению вида системы уравнений газодинамики и соответствующих соотношений переноса, получаемые системы уравнений называют уравнениями *релаксационной газодинамики*. В гл. 8 излагается феноменологическая теория этих уравнений, включающих уравнения баланса заселенностей возбужденных уровней энергии частиц. В частных случаях для конкретных соотношений между временами релаксации различных процессов уравнения баланса заселенностей заменяются более простыми, например, уравнениями баланса колебательных температур. Гл. 9 посвящена уравнениям релаксационной газодинамики и соотношениям переноса, получаемым на основе обобщенного метода Чепмена–Энскога, либо (для некоторых конкретных связей между временами релаксации) — с помощью модифицированного метода Чепмена–Энскога. Получаемые при этом строгие формулы для коэффициентов переноса носят, как правило, формальный характер из-за недостаточности данных о сечениях неупругих межмолекулярных взаимодействий. Некоторые приближенные формулы для коэффициентов переноса в этих случаях, пригодные для практического применения, приведены в гл. 10. В гл. 11, 12 представлен обзор моделей процессов переноса в плазме и соответствующие коэффициенты переноса.

Приведенные в настоящем томе уравнения и модели могут быть использованы в гиперзвуковой аэродинамике, в газодинамике внутренних течений высокотемпературных газов, в лазерной и плазменной газодинамике, а также в ряде задач горения и химической технологии.

Авторы

Введение

1. Основные понятия

Среда — вещество, заполняющее некоторое пространство и состоящее из большого числа частиц (атомов, молекул, электронов, ионов), взаимодействующих между собой и с внешними полями. В газовой динамике исследуемой средой является *нейтральный газ, слабо ионизованный газ и плазма*.

Газ — среда, в которой составляющие ее частицы — атомы и молекулы — свободно и хаотично движутся в промежутках между столкновениями. Время столкновения частиц в идеальном газе по величине на много порядков меньше среднего времени их свободного пробега. Степень разреженности среды в газовой динамике определяется значением числа Кнудсена $Kn = l_0/l_*$, где l_0 — средняя длина свободного пробега частиц в газе, l_* — характерный линейный размер в рассматриваемой задаче газовой динамики (характерная газодинамическая длина):

- сплошная среда $Kn \ll 1$;
- переходная область $Kn \sim 1$;
- сильно разреженный газ $Kn \gg 1$.

Примеры вычисления средней длины свободного пробега и среднего времени свободного пробега приведены в [1–5].

Плазма — газообразная среда, электрически нейтральная в каждом физически малом объеме, состоящая из ионизованных и нейтральных частиц. При этом характерная газодинамическая длина l_* много больше дебаевского радиуса R_D :

$$l_* \gg R_D = \left(\frac{\varepsilon_0 k T_e}{n_e e^2} \right)^{1/2},$$

где ε_0 — электрическая постоянная; T_e — температура электронов; n_e — концентрация электронов; e — заряд электрона.

Идеальный газ и идеальная плазма — газовые среды, в которых средняя кинетическая энергия движения частиц (атомов, молекул, ионов, электронов) много больше усредненной по времени потенциальной энергии их взаимодействия.

Критерии идеальности газа и плазмы см. [2].

Примечание: В некоторых публикациях по газовой динамике понятие «идеальный газ» применяется в другом смысле: идеальный газ — это газ, при описании которого можно пренебрегать его вязкостью и теплопроводностью. При описании некоторых моделей использованы результаты [3–5].

Явления переноса (транспортные явления) — необратимые процессы пространственного переноса какой-либо физической величины, происходящие в неоднородных сплошных средах вследствие взаимо-

действия хаотически движущихся частиц (диффузия, термодиффузия, теплопроводность, вязкость, электропроводность).

- *Теплопроводность* — процесс переноса энергии частиц по направлению к среде, имеющей меньшую температуру, вследствие хаотического движения и столкновений частиц в газе.
- *Вязкость* — процесс внутреннего трения частей газовой среды как характеристика сопротивления смещению одного слоя газа относительно другого так, что слой газа, движущийся с повышенной скоростью, ускоряет близлежащие слои в результате передачи импульса частиц газа при их столкновениях.
- *Диффузия* — процесс распространения частиц определенного вида в направлении меньшей концентрации этих частиц вследствие хаотического движения и столкновений частиц в газе.
- *Термодиффузия* — процесс диффузии под влиянием градиента температуры в газовой смеси.
- *Электрический ток* — процесс переноса электрического заряда через рассматриваемую среду под действием электрического поля.

Переносные (транспортные) свойства среды — связи между плотностями потоков (интенсивностями переноса) физической величины и градиентами газодинамических переменных в сплошных средах или внешними полями (другое название: соотношения переноса).

Коэффициенты переноса (кинетические коэффициенты) — коэффициенты пропорциональности между плотностями потоков и градиентами в соотношениях переноса.

В табл. приведены размерности коэффициентов переноса в различных системах единиц.

Коэффициент переноса	Система СГС	Система СИ
Коэффициент теплопроводности	эрг/см · с · К	Вт/м · К
Коэффициент вязкости	г/см · с	Па · с
Коэффициент диффузии	см ² /с	м ² /с
Коэффициент электропроводности (проводимость)	с ⁻¹	См/м

Быстрые обмены внутренней энергией частиц происходят тогда, когда соответствующее время релаксации много меньше характерного газодинамического времени. При быстрых обменах распределение энергии по соответствующим внутренним степеням свободы близко к *локально-равновесному (слабо неравновесное состояние)*.

Медленные обмены внутренней энергией частиц происходят тогда, когда соответствующее время релаксации больше или порядка характерного газодинамического времени. При медленных обменах распределение энергии по соответствующим внутренним степеням свободы

сильно отклоняется от локально-равновесного (сильно неравновесное состояние).

2. Основные обозначения

Общие

N_A — число Авогадро
 k — постоянная Больцмана
 R — универсальная газовая постоянная
 c — скорость света
 e — элементарный электрический заряд
 h — постоянная Планка
 ε_0 — электрическая постоянная
 μ_0 — магнитная постоянная

Газодинамические переменные

i, j, k, l — номера химических компонентов смеси, принимающие значения от 1 до N
 N — число химических компонентов смеси
 $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ — номера квантовых уровней частиц, принимающие значения от 1 до $N^{(i)}, N^{(j)}, N^{(k)}, N^{(l)}$ соответственно
 $N^{(i)}, N^{(j)}, N^{(k)}, N^{(l)}$ — число квантовых уровней частиц химических компонентов i, j, k, l соответственно
 $n_{i\alpha}$ — заселенность или плотность числа частиц компонента i в квантовом состоянии α (концентрация частиц сорта $i\alpha$)
 $y_{i\alpha}$ — относительная заселенность уровня
 n_i — плотность числа частиц компонента i (концентрация)
 ρ_i — массовая плотность компонента i
 x_i — молярная доля компонента i
 α_i — массовая доля компонента i
 \widetilde{M}_i — молярная масса компонента i
 n_d — концентрация не превращающихся при химических реакциях частиц компонента d (атомов одного химического элемента)
 n — плотность числа частиц смеси (концентрация)
 ρ — массовая плотность смеси
 \mathbf{v} — среднемассовая скорость частиц смеси
 T — температура смеси
 p — гидростатическое давление
 u — внутренняя энергия единицы массы смеси
 ε — полная энергия единицы массы смеси
 \mathbf{r} — радиус-вектор точки физического пространства
 t — время.

Переносные свойства

$\mathbf{V}_{i\alpha}$ — вектор диффузионной скорости частиц компонента i , находящихся в квантовом состоянии α (сорта $i\alpha$)
 \mathbf{V}_i — вектор диффузионной скорости частиц компонента i

\mathbf{J}_i — вектор плотности массового диффузионного потока компонента i
 $\mathbf{\Pi}(\mathbf{r}, t)$ — полный тензор вязких напряжений, или тензор давлений
 P — дивергенция (след, шпур) полного тензора давлений
 p_V — вклад объемной вязкости в след полного тензора давлений
 $\boldsymbol{\pi}$ — бездивергентный (с нулевым следом) тензор напряжений
 \mathbf{q} — вектор плотности полного теплового потока
 \mathbf{h} — вектор плотности приведенного теплового потока
 \mathbf{j} — вектор плотности тока проводимости.

Коэффициенты переноса

η — коэффициент вязкости (коэффициент сдвиговой вязкости)
 η_V — коэффициент объемной вязкости
 D_{ij} — коэффициент диффузии многокомпонентной смеси
 \mathcal{D}_{ij} — коэффициент диффузии бинарной смеси газов компонентов i и j
 \mathcal{D}_{ii} — коэффициент самодиффузии смеси газов из частиц компонента i
 D_{Ti} — коэффициент термодиффузии многокомпонентной смеси
 D_T — коэффициент термодиффузии бинарной смеси
 k_{Ti} — термодиффузионное отношение
 k_T — термодиффузионное отношение бинарной смеси
 λ — коэффициент теплопроводности
 σ — коэффициент электропроводности (проводимость).

Источниковые слагаемые уравнений баланса

$K_{i\alpha}$ — производство частиц сорта $i\alpha$ за счет переходов между уровнями и химических реакций
 K_i — производство частиц компонента i в результате химических реакций
 R_i — масса компонента i , возникающая в единице объема в единицу времени в результате химических реакций.

Параметры частиц

m_i — масса частицы компонента i
 d_i — эффективный диаметр частицы компонента i
 \mathbf{c}_i — скорость частицы компонента i
 \mathbf{C}_i — собственная скорость частицы компонента i ($\mathbf{C}_i = \mathbf{c}_i - \mathbf{v}$)
 $E_{i\alpha}$ — внутренняя энергия частицы сорта $i\alpha$
 E_i^{ch} — энергия образования частиц компонента i (при наличии химических реакций)
 $S_{i\alpha}$ — статистический вес состояния $i\alpha$
 $m_i \mathbf{F}_i(\mathbf{r}, t)$ — внешняя сила, действующая на частицу компонента i
 $\sigma_{i\alpha j\beta}^{k\gamma l\delta}$ — сечение рассеяния молекул, характеризующее плотность вероятности перехода частиц со скоростями $\mathbf{c}_i, \mathbf{c}_j$ и внутренними энергиями

$E_{i\alpha}, E_{j\beta}$ в частицы со скоростями $\mathbf{c}_k, \mathbf{c}_l$ и внутренними энергиями $E_{k\gamma}, E_{l\delta}$ соответственно

\mathbf{W}_i — отношение собственной скорости частицы к наиболее вероятной скорости частиц компонента i

$\varepsilon_{i\alpha}$ — отношение энергии $E_{i\alpha}$ к величине, равной $2/3$ средней энергии теплового движения частиц

$\mathbf{c}_i, \mathbf{c}_j$ — скорости частиц компонентов i, j до столкновения

$\mathbf{c}'_i, \mathbf{c}'_j$ — скорости частиц компонентов i, j после столкновения (в отсутствие химических реакций)

$\mathbf{c}'_k, \mathbf{c}'_l$ — скорости частиц компонентов k, l после столкновения при бинарных химических реакциях

$\mathbf{C}_i, \mathbf{C}_j$ — собственные скорости частиц компонентов i, j до столкновения

$\mathbf{C}'_i, \mathbf{C}'_j, \mathbf{C}'_k, \mathbf{C}'_l$ — собственные скорости частиц после столкновения

Функции распределения

$f_i(\mathbf{c}_i, \mathbf{r}, t)$ — функция распределения по скоростям частиц компонента i

$f_{i\alpha}(\mathbf{c}_i, E_{i\alpha}, \mathbf{r}, t)$ — функция распределения по скоростям и внутренним энергиям частиц сорта $i\alpha$

$f^{(0)}, f^{(1)}$ — функции распределения в нулевом и первом приближении

$\bar{\phi}_i, \bar{\phi}_{i\alpha}$ — средние значения молекулярных признаков (свойств)

$\phi_i(\mathbf{c}_i, \mathbf{r}, t), \phi_{i\alpha}(\mathbf{c}_i, E_{i\alpha}, \mathbf{r}, t)$

$\langle \phi_i \rangle, \langle \phi_{i\alpha} \rangle$ — средние значения молекулярных признаков (свойств)

$\phi_i(\mathbf{C}_i, \mathbf{r}, t), \phi_{i\alpha}(\mathbf{C}_i, E_{i\alpha}, \mathbf{r}, t)$ (функций от собственных скоростей и внутренней энергии частиц сорта $i\alpha$).

Другие обозначения

A^* — безразмерное значение величины A

l_0 — характерная для данной области течения средняя длина свободного пробега

τ_0 — характерное для данной области течения среднее время свободного пробега

l_* — характерная газодинамическая длина

t_* — характерное газодинамическое время

Kn — число Кнудсена: отношение l_0 к l_* или τ_0 к t_* .

Обозначения в кинетических уравнениях

$D_L(f_L)$ — конвективная часть кинетического уравнения для частицы компонента L

J_L — оператор столкновений частиц компонента L друг с другом и с частицами других компонентов

g — модуль относительной скорости сталкивающихся частиц

b — прицельное расстояние ($b \in [0, \infty]$)

φ — азимутальный угол ($\varphi \in [0, 2\pi]$)

$\sigma_{ij}(\chi, g)$ — дифференциальное сечение упругого рассеяния частиц, характеризующее плотность вероятности изменения скоростей частиц $\mathbf{c}_i, \mathbf{c}_j \rightarrow \mathbf{c}'_i, \mathbf{c}'_j$

$d\Omega$ — элемент телесного угла рассеяния

χ — угол рассеяния ($\chi \in [0, \pi]$)

$\sigma_{i\omega j\psi}^{k\lambda\gamma}$ — сечение рассеяния молекул, характеризующее плотность вероятности перехода частиц со скоростями $\mathbf{c}_i, \mathbf{c}_j$ и внутренними энергиями $E_{i\omega}, E_{j\psi}$ в частицы со скоростями $\mathbf{c}_k, \mathbf{c}_l$ и внутренними энергиями $E_{k\lambda}, E_{l\gamma}$ соответственно.

3. Основные определения

Относительная заселенность уровня

$$y_{i\alpha} = \frac{n_{i\alpha}}{n_i}; \quad \sum_{\alpha} y_{i\alpha} = 1.$$

Среднемассовая скорость возбужденных частиц

$$\mathbf{v}(\mathbf{r}, t) = \rho^{-1} \sum_{i\alpha} n_{i\alpha} m_i \bar{\mathbf{v}}_i.$$

Диффузионная скорость частиц сорта $i\alpha$

$$\mathbf{V}_{i\alpha}(\mathbf{r}, t) = \langle \mathbf{C}_{i\alpha} \rangle.$$

Относительная внутренняя энергия частиц сорта $i\alpha$

$$\varepsilon_{i\alpha} = \frac{E_{i\alpha}}{kT}.$$

Плотность числа частиц компонента i

$$n_i(\mathbf{r}, t) = \sum_{\alpha} n_{i\alpha}.$$

Массовая плотность компонента i

$$\rho_i(\mathbf{r}, t) = m_i n_i.$$

Молярная доля компонента i

$$x_i = n_i/n.$$

Массовая доля компонента i

$$\alpha_i = \rho_i/\rho.$$

Плотность числа атомов компонента d

$$n_d = \sum_{i\alpha} n_{i\alpha} X_{i\alpha}^{(d)},$$

где $X_i^{(d)}$ — количество атомов d в молекуле компонента i .

Средняя скорость частиц компонента i

$$\bar{\mathbf{v}}_i = \sum_{\alpha} y_{i\alpha} \mathbf{v}_{i\alpha}.$$

Диффузионная скорость

$$\mathbf{V}_i(\mathbf{r}, t) = \langle \mathbf{C}_i \rangle = \bar{\mathbf{v}}_i - \mathbf{v}; \quad \sum_i \rho_i \mathbf{V}_i = 0.$$

Диффузионная скорость частиц компонента i

$$\mathbf{V}_i(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{n_i} \sum_{\alpha} n_{i\alpha} \mathbf{v}_{i\alpha}.$$

Средняя арифметическая (тепловая) скорость частиц компонента i

$$v_{i\tau} = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m_i}}.$$

Наиболее вероятная скорость частиц

$$v_{i\text{в}} = \sqrt{\frac{2kT}{\pi m_i}}.$$

Вектор плотности массового диффузионного потока компонента i

$$\mathbf{J}_i = \rho_i \mathbf{V}_i.$$

Производство частиц компонента i в результате химических реакций

$$K_i = \sum_{\alpha} K_{i\alpha}.$$

Удельная масса компонента i , возникающая в результате химических реакций

$$R_i = m_i K_i.$$

Плотность числа частиц смеси (концентрация)

$$n(\mathbf{r}, t) = \sum_i n_i.$$

Массовая плотность смеси

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_i m_i n_i.$$

Среднемассовая скорость частиц смеси

$$\mathbf{v}(\mathbf{r}, t) = \rho^{-1} \sum_i n_i m_i \bar{\mathbf{v}}_i.$$

Средняя энергия частицы смеси

$$\varepsilon = \frac{1}{n} \sum_{i\alpha} n_{i\alpha} \left\langle \frac{m_i \mathbf{C}_i^2}{2} + E_{i\alpha} \right\rangle.$$

Поступательная температура

$$T = \frac{1}{3nk} \sum_{i\alpha} n_{i\alpha} m_i \langle \mathbf{C}_i^2 \rangle.$$

Тензор напряжений (или тензор давлений)

$$\mathbf{\Pi}(\mathbf{r}, t) = \sum_i n_i m_i \langle \mathbf{C}_i \mathbf{C}_i \rangle = P \boldsymbol{\delta} + \boldsymbol{\pi},$$

где P — скалярная величина.

Симметричный бездивергентный (с нулевым шпуром) тензор второго ранга

$$\boldsymbol{\pi}(\mathbf{r}, t) = \sum_i n_i m_i \left\langle \mathbf{C}_i \mathbf{C}_i - \frac{1}{3} \delta \mathbf{C}_i^2 \right\rangle.$$

Вектор плотности полного теплового потока

$$\mathbf{q} = \mathbf{q}_t + \mathbf{q}_v.$$

Вектор плотности теплового потока из-за переноса поступательной энергии частиц

$$\mathbf{q}_t = \sum_{i\alpha} n_{i\alpha} \frac{m_i}{2} \langle \mathbf{C}_i \mathbf{C}_i^2 \rangle.$$

Вектор плотности теплового потока из-за переноса внутренней энергии частиц сорта $i\alpha$

$$\mathbf{q}_v = \sum_{i\alpha} n_{i\alpha} E_{i\alpha} \mathbf{V}_{i\alpha}.$$

Средняя длина свободного пробега молекул

$$l_0 = \frac{1}{\sqrt{2} n \pi d_i^2}.$$

Примечание. Для сокращения обозначений опускаются запятые в наборах индексов, например, $i\alpha \equiv i, \alpha$. В общем случае индекс α представляет собой конечный набор индексов, зависящий от свойств частиц и вида и степени возбуждения. Например:

$$\alpha = \alpha_R \alpha_V^{(m)} \alpha_{эл} \equiv \alpha_R, \alpha_V^{(m)}, \alpha_{эл}; \quad \sum_{i\alpha} = \sum_{i \alpha_R \alpha_V^{(m)} \alpha_{эл}} = \sum_{i \alpha_R, \alpha_V^{(m)}, \alpha_{эл}},$$

где α_R , $\alpha_V^{(m)}$, $\alpha_{эл}$ — вращательный, колебательный (мода $m \in [1, M]$, M — число мод) и электронный квантовые энергетические уровни соответственно; суммирование проводится по всем значениям индек-

сов. Для молекулярных низкотемпературных газов обычно $\alpha = \alpha_R$, для высокотемпературных инертных газов $\alpha = \alpha_{эл}$. Для одноатомных частиц индекс α при обычно опускается.

4. Математические операции

Векторы и тензоры обозначаются полужирным шрифтом. Используются ортогональная правая декартова система координат. Применяется правило суммирования по повторяющимся индексам $n, m, l = 1, 2, 3$.

\mathbf{e}_n — единичный вектор вдоль оси n ;

$\mathbf{a} = a_1 \mathbf{e}_1 + a_2 \mathbf{e}_2 + a_3 \mathbf{e}_3 \equiv a_m \mathbf{e}_m$ — вектор с проекциями a_m , $m = 1, 2, 3$;

\mathbf{r} — радиус-вектор точки физического пространства с проекциями r_m (или x, y, z);

$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = a_1 b_1 + a_2 b_2 + a_3 b_3 \equiv a_m b_m$ — скалярное произведение векторов \mathbf{a} и \mathbf{b}

$$\nabla \cdot \mathbf{a} \equiv \text{div } \mathbf{a} \equiv \frac{\partial a_1}{\partial r_1} + \frac{\partial a_2}{\partial r_2} + \frac{\partial a_3}{\partial r_3} \equiv \frac{\partial a_m}{\partial r_m},$$

$$\nabla T \equiv \text{grad } T \equiv \frac{\partial T}{\partial r_1} \mathbf{e}_1 + \frac{\partial T}{\partial r_2} \mathbf{e}_2 + \frac{\partial T}{\partial r_3} \mathbf{e}_3 \equiv \frac{\partial T}{\partial r_m} \mathbf{e}_m$$

(T — скалярная величина),

$$\mathbf{a} \cdot \nabla \mathbf{b} \equiv a_1 \frac{\partial \mathbf{b}}{\partial r_1} + a_2 \frac{\partial \mathbf{b}}{\partial r_2} + a_3 \frac{\partial \mathbf{b}}{\partial r_3} \equiv a_m \frac{\partial \mathbf{b}}{\partial r_m},$$

$$\mathbf{a} \cdot \nabla T \equiv a_m \frac{\partial T}{\partial r_m}.$$

$\frac{dA}{dt} = \frac{\partial A}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla A$ — конвективная производная (здесь \mathbf{v} — средне-массовая скорость, A — векторная или скалярная величина)

\mathbf{ab} — диада, т.е. тензор второго ранга с компонентами $a_m b_n$, $n, m = 1, 2, 3$, представляющий собой тензорное произведение векторов \mathbf{a} и \mathbf{b} . Диада \mathbf{CC} включает компоненты C_n, C_m .

$\mathbf{\Pi}$ — симметричный тензор второго ранга с компонентами Π_{nm} , $n, m = 1, 2, 3$.

Выделение бездивергентной части: $\mathbf{\Pi} = P\delta + \boldsymbol{\pi}$.

$\boldsymbol{\pi}$ — симметричный бездивергентный (т.е. с нулевым следом) тензор второго ранга ($\pi_1 + \pi_2 + \pi_3 = 0$).

P — дивергенция (след) тензора $\mathbf{\Pi}$ ($P = \Pi_1 + \Pi_2 + \Pi_3$).

δ — единичный тензор ($\delta_{11} = \delta_{22} = \delta_{33} = 1$, $\delta_{nm} = 0$ при $n \neq m$).

\mathbf{S} — тензор скоростей сдвига с компонентами

$$S_{nm} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_n}{\partial r_m} + \frac{\partial v_m}{\partial r_n} \right) - \frac{1}{3} \delta_{nm} \nabla \cdot \mathbf{v}.$$

Свертка произведения тензора на вектор по повторяющимся индексам (далее в соответствии с [5] называемая простым произведением тензора на вектор) является вектором, например:

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\pi} \equiv \frac{\partial \pi_{m1}}{\partial r_m} \mathbf{e}_1 + \frac{\partial \pi_{m2}}{\partial r_m} \mathbf{e}_2 + \frac{\partial \pi_{m3}}{\partial r_m} \mathbf{e}_3; \quad m = 1, 2, 3.$$

Свертка произведения тензоров второго ранга по повторяющимся индексам (далее в соответствии с [5] называемая простым произведением тензора на тензор), является тензором этого же ранга, например: $\boldsymbol{\pi} : \nabla \mathbf{v}$ — тензор с компонентами

$$\pi_{nl} \frac{\partial v_m}{\partial r_l} \equiv \pi_{n1} \frac{\partial v_m}{\partial r_1} + \pi_{n2} \frac{\partial v_m}{\partial r_2} + \pi_{n3} \frac{\partial v_m}{\partial r_3}; \quad n, m, l = 1, 2, 3.$$

Двойное произведение тензоров второго ранга является скаляром: например,

$$\mathbf{C} \mathbf{C} : \nabla \mathbf{v} = C_n C_l \frac{\partial v_n}{\partial r_l}; \quad n, l = 1, 2, 3.$$

Операции в пространстве скоростей частиц описаны в гл. 3. В частности,

$$\nabla_c = \frac{\partial}{\partial \mathbf{c}_i}, \quad \nabla_C = \frac{\partial}{\partial \mathbf{C}_i}.$$

Полиномы Сонина

$S_\nu^{(n)}(x)$ — полином Сонина n -го порядка (n — целое число) с индексом ν

$$S_\nu^{(n)}(x) = \sum_{m=0}^n \frac{\Gamma(\nu + n + 1)}{(n - m)! m! \Gamma(\nu + m)} (-x)^m \quad (\Gamma — \text{гамма-функция}).$$

В частности,

$$\begin{aligned} S_\nu^{(0)}(x) &= 1; \quad S_\nu^{(1)}(x) = \nu + 1 - x, \\ S_\nu^{(2)}(x) &= \frac{(\nu + 2)(\nu + 1)}{2} - (\nu + 2)x + \frac{x^2}{2}. \end{aligned}$$

Соотношения ортогональности

$$\int_0^\infty e^{-x} S_\nu^{(m)}(x) S_\nu^{(n)}(x) x^\nu dx = \begin{cases} 0, & n \neq m, \\ \frac{\Gamma(\nu + n + 1)}{n!}, & m = n. \end{cases}$$

Полиномы Вальдмана–Трубенбахера

Полиномы Вальдмана–Трубенбахера для дискретных уровней вращательной энергии $E_{i\alpha}$ задаются рекуррентным соотношением

$$P_{i\alpha}^{(n)} = -\varepsilon_{i\alpha} P_{i\alpha}^{(n-1)} + \sum_{m=0}^{n-1} \frac{\langle \varepsilon_{i\alpha} P_{i\alpha}^{(n-1)} P_{i\alpha}^{(m)} \rangle}{\langle (P_{i\alpha}^{(m)})^2 \rangle} P_{i\alpha}^{(m)}.$$

Диагональные элементы равны

$$P_{i\alpha}^{(m)} \equiv P_{i\alpha}^{(m)}(\varepsilon_{i\alpha}).$$

Операция вычисления среднего значения величины $\langle A_{i\alpha} \rangle$ определена формулой

$$\langle A_{i\alpha} \rangle = \frac{\sum_{\alpha} A_{i\alpha} S_{i\alpha} \exp(-\varepsilon_{i\alpha})}{\sum_{\alpha} S_{i\alpha} \exp(-\varepsilon_{i\alpha})}.$$

В частности,

$$P_{i\alpha}^{(0)} = 1, \quad P_{i\alpha}^{(1)} = \langle \varepsilon_{i\alpha} \rangle - \varepsilon_{i\alpha}.$$

Соотношение ортогональности

$$\langle P_{i\alpha}^{(m)} P_{i\alpha}^{(n)} \rangle = \begin{cases} 0, & m \neq n, \\ \langle (P_{i\alpha}^{(n)})^2 \rangle, & m = n. \end{cases}$$

Список литературы к введению

1. Физико-химические процессы в газовой динамике: Справочник / Под ред. Г. Г. Черного и С. А. Лосева. Т. 1. Динамика физико-химических процессов в газе и плазме. — М.: Научный мир, 2007. — 400 с.
2. Физико-химические процессы в газовой динамике: Справочник / Под ред. Г. Г. Черного и С. А. Лосева. Т. 2. Физико-химическая кинетика и термодинамика. — М.: Науч.-издат. Центр механики, 2002. — 368 с.
3. Гирифельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей. — М.: Изд-во иностр. лит., 1961. — 930 с.
4. Чепмен С., Каулинг Т. Математическая теория неоднородных газов. — М.: Изд-во иностр. лит., 1960. — 510 с.
5. Ферцигер Дж., Капер Г. Математическая теория процессов переноса в газах. — М.: Мир, 1976. — 554 с.

Глава 1

УРАВНЕНИЯ БАЛАНСА ДЛЯ МНОГОКОМПОНЕНТНОЙ СРЕДЫ

1.1. Общие уравнения баланса

В основе феноменологического вывода уравнений газодинамики лежат законы сохранения плотности макроскопических параметров, характеризующих состояние среды, или *уравнения баланса*. К ним относятся *уравнения неразрывности (уравнения баланса массы), уравнение движения (уравнение баланса импульса), уравнение баланса энергии и уравнение баланса энтропии* [1–5].

1.1.1. Общий вид уравнения баланса в интегральной форме

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho A dV = - \int_{\Omega} \mathbf{J}_A d\Omega + \int_V \sigma_A dV, \quad (1.1)$$

$$\rho A = \begin{cases} \rho \\ \rho \mathbf{v} \\ \rho \varepsilon \\ \rho s \end{cases}, \quad \sigma_A = \sigma_A^I + \sigma_A^{II}.$$

1.1.2. Общий вид уравнения баланса в дифференциальной форме, или локальное уравнение баланса

$$\frac{\partial \rho A}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{J}_A + \sigma_A. \quad (1.2)$$

Обозначения

$\rho \mathbf{v}$ — плотность импульса (импульс единицы объема среды)
 $\rho \varepsilon$ — плотность энергии (энергия единицы объема среды)
 ρs — плотность энтропии (энтропия единицы объема среды)
 ρA — плотность величины A
 \mathbf{J}_A — плотность потока величины ρA (далее поток величины)
 σ_A — интенсивность источника (производство величины ρA)
 σ_A^I — изменение величины ρA в результате действия внешних сил
 σ_A^{II} — производство величины ρA в результате внутренних диссипативных процессов и химических превращений

V — объем рассматриваемой системы
 Ω — поверхность рассматриваемой системы.

Комментарии

1. Общие уравнения баланса в форме (1.1) и (1.2) записаны для среды в целом.

2. Переход от интегральной к дифференциальной формулировке уравнений баланса осуществляется в результате преобразования интеграла по поверхности (первый член справа в уравнении (1.1)) в интеграл по объему с помощью теоремы Гаусса–Остроградского и последующего приравнивания соответствующих подынтегральных выражений.

1.1.3. Локальные уравнения баланса для смеси

Для многокомпонентной смеси уравнения баланса записываются для каждого компонента среды.

Уравнение неразрывности для компонента смеси

Уравнение баланса числа частиц компонента i

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = -\nabla \cdot n_i \mathbf{v}_i + K_i, \quad (1.3)$$

Уравнение баланса массы компонента i

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} = -\nabla \cdot \rho_i \mathbf{v}_i + R_i. \quad (1.4)$$

Определение K_i см. введение, [2], R_i определяется согласно выражению (1.10).

Ниже рассматриваются различные формы представления уравнений баланса для газовой смеси, состоящей из N реагирующих компонентов. При этом используется запись уравнений баланса в массовых переменных.

1.2. Уравнения неразрывности

1.2.1. Уравнение баланса массы компонента i

$$\frac{d\rho_i}{dt} = -\rho_i \nabla \cdot \mathbf{v} - \nabla \cdot \mathbf{J}_i + R_i. \quad (1.5)$$

1.2.2. Уравнение сохранения массы смеси

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho \nabla \cdot \mathbf{v}. \quad (1.6)$$

1.2.3. Уравнение для массовой концентрации компонента i , или уравнение диффузии

$$\rho \frac{dc_i}{dt} = -\nabla \cdot \mathbf{J}_i + R_i. \quad (1.7)$$

При записи уравнений (1.5)–(1.7) используется оператор полной (субстанциональной) производной:

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla).$$

Обозначения

J_j — скорость j -й химической реакции [моль/см³·с]

$\nu_{ij} \widetilde{M}_i J_j$ — масса компонента i , возникающего в j -й химической реакции в единице объема в единицу времени

ν_{ij} — стехиометрический коэффициент, с которым компонент i входит в уравнение j -й реакции

Определения

Массовая концентрация компонента i в смеси

$$c_i = \frac{\rho_i}{\rho}.$$

Вектор плотности массового диффузионного потока компонента i

$$\mathbf{J}_i = \rho_i \mathbf{V}_i. \quad (1.8)$$

Среднемассовая скорость частиц смеси

$$\mathbf{v} = \rho^{-1} \sum_i \rho_i \bar{\mathbf{v}}_i. \quad (1.9)$$

Масса компонента i , возникающая в единице объема в единицу времени в результате химических реакций

$$R_i = m_i K_i = \sum_{j=1}^r \nu_{ij} \widetilde{M}_i J_j. \quad (1.10)$$

Комментарии

1. Уравнение сохранения массы смеси (1.6) следует из общего уравнения баланса (1.2) при $\rho A = \rho$. Оно получается при суммировании уравнений (1.5) по i . При этом из определения среднемассовой скорости (1.9) следует, что

$$\sum_{i=1} \mathbf{J}_i = 0. \quad (1.11)$$

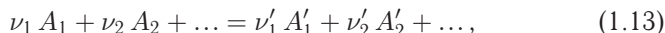
Член, связанный с источником R_i , обращается при суммировании в нуль в соответствии с условием сохранения массы частиц в каждой химической реакции:

$$\sum_{i=1}^N \nu_{ij} \widetilde{M}_i = 0, \quad j = 1, \dots, r,$$

откуда следует, что

$$\sum_{i=1}^N R_i = \sum_{j=1}^r J_j \sum_{i=1}^N \nu_{ij} \widetilde{M}_i = 0. \quad (1.12)$$

2. При записи выражения (1.10) для R_i предполагается, что в рассматриваемой газовой смеси, состоящей из N компонентов, протекают r химических реакций по схеме



где ν_i, ν'_i — стехиометрические коэффициенты реакции; A_i — символы исходных веществ; A'_i — символы продуктов реакции.

3. Уравнение для массовой концентрации (1.7) — уравнение диффузии — следует из уравнения (1.5), если использовать уравнение сохранения массы смеси (1.6).

1.3. Уравнение сохранения массы химических элементов

В химических реакциях отдельный химический элемент не исчезает и не возникает, переходя из одного соединения в другое.

1.3.1. Условие сохранения массы элементов в реакциях [5]

$$\sum_{i=1}^N \nu_{ji} n_{id} m_d = 0; \quad j = 1, \dots, r; \quad d = 1, \dots, L. \quad (1.14)$$

1.3.2. Уравнение диффузии элементов

$$\rho \frac{dc_k}{dt} = -\nabla \cdot \mathbf{J}_k; \quad k = 1, \dots, L. \quad (1.15)$$

Обозначения

n_{id} — число химических элементов с индексом d в компоненте i

L — число элементов, составляющих смесь.

Определения

Массовая концентрация c_k химического элемента k

$$c_k = \sum_{i=1}^N \frac{n_{ik} m_k}{m_i} c_i, \quad k = 1, \dots, L. \quad (1.16)$$

Диффузионный поток химического элемента k

$$\mathbf{J}_k = \sum_{i=1}^N \frac{n_{ik} m_k}{m_i} \mathbf{J}_i, \quad k = 1, \dots, L. \quad (1.17)$$

Комментарий

В уравнениях (1.15) в отличие от (1.7) отсутствуют члены, связанные с образованием компонента i в химических реакциях. При этом

для c_k и \mathbf{J}_k при суммировании по индексу k , так же как для c_i и \mathbf{J}_i при суммировании по индексу i , выполнены условия

$$\sum_{k=1}^L c_k = 1; \quad \sum_{k=1}^L \mathbf{J}_k = 0.$$

1.4. Уравнение баланса импульса

1.4.1. Уравнение баланса импульса

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \mathbf{v} = -\nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v} + \mathbf{\Pi}) + \sum_i \rho_i \mathbf{F}_i. \quad (1.18)$$

1.4.2. Уравнение движения

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\nabla \mathbf{\Pi} - \sum_i \rho_i \mathbf{F}_i. \quad (1.19)$$

Обозначения

P — след (дивергенция, шпур) тензора напряжений

\mathbf{F}_i — внешняя сила, действующая на единицу массы i -го компонента.

Определение

Симметричный тензор напряжений (или тензор давлений)

$$\mathbf{\Pi} = P\delta + \pi. \quad (1.20)$$

Комментарии

1. Уравнение баланса импульса (1.18) следует из общего уравнения баланса (1.2) при $\rho A = \rho \mathbf{v}$. При этом величина $\rho \mathbf{v} \mathbf{v} + \mathbf{\Pi}$ представляет поток импульса с конвективной составляющей $\rho \mathbf{v} \mathbf{v}$, а величина $\sum_i \rho_i \mathbf{F}_i$ — источник, приводящий к изменению плотности импульса в результате действия внешних сил.

2. Переход от уравнения баланса импульса (1.18) к уравнению движения (1.19) осуществляется с применением уравнения сохранения массы смеси (1.6).

3. Для идеального газа бесструктурных молекул $P = p$, где p — гидростатическое давление (кратко — давление) газовой смеси. Для газа многоатомных молекул и плотного газа скалярная величина P включает также члены, соответствующие объемной вязкости [6, 7] и релаксационному давлению [8].

4. Представление величины $\mathbf{\Pi}$ в виде выражения (1.20) используется в кинетической теории [4, 6, 7] и в неравновесной термодинамике [1, 4]. В кинетической теории величина π называется *тензором вязких напряжений*. В газовой динамике [2, 3] принято представление тензора $\mathbf{\Pi}$ в виде

$$\mathbf{\Pi} = P\delta - \tau, \quad \text{где } \tau = -\pi.$$

1.5. Уравнения баланса энергии

1.5.1. Уравнение баланса полной энергии

$$\frac{\partial \rho \varepsilon}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{J}_\varepsilon. \quad (1.21)$$

Обозначения

ψ_i — потенциал внешнего поля консервативных сил, действующих на единицу массы компонента i .

Определения

Полная удельная энергия (энергия единицы массы среды)

$$\varepsilon = \frac{1}{2} v^2 + \psi + u. \quad (1.22)$$

Плотность потока полной энергии

$$\mathbf{J}_\varepsilon = \rho \varepsilon \mathbf{v} + \mathbf{\Pi} \cdot \mathbf{v} + \sum_i \psi_i \mathbf{J}_i + \mathbf{q}. \quad (1.23)$$

Плотность потенциальной энергии среды

$$\rho \psi = \sum_i \rho_i \psi_i. \quad (1.24)$$

Комментарии

1. Уравнение баланса полной энергии (1.21) следует из общего уравнения баланса (1.2) при $\rho A = \rho \varepsilon$, где ε определено выражением (1.22).

2. Из соотношения (1.22) следует определение понятия удельной внутренней энергии u . Полная энергия единицы объема среды равна сумме энергии отдельных частиц в единице объема, включая кинетическую энергию их поступательного движения и энергию внутренних движений в молекулах, связанную с их вращательными, колебательными и электронными степенями свободы. Внутренняя энергия единицы объема среды nU получается в результате вычитания из полной энергии ее составляющих, соответствующих кинетической энергии этого объема как целого со скоростью центра масс и потенциальной энергии частиц во внешнем поле. Удельная внутренняя энергия единицы массы среды u получается из соотношения $nU = \rho u$, где U — средняя энергия одной частицы смеси. Тепловой поток \mathbf{q} соответствует переносу внутренней энергии. Его определение также следует из общего соотношения для вектора плотности потока полной энергии (1.23).

1.5.2. Уравнение баланса внутренней энергии

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho u = -\nabla \cdot (\rho u \mathbf{v} + \mathbf{q}) - \mathbf{\Pi} : \nabla \mathbf{v} + \sum_i \mathbf{J}_i \cdot \mathbf{F}_i. \quad (1.25)$$

Различные формы представления уравнения (1.25)*Уравнение изменения удельной внутренней энергии u*

$$\rho \frac{du}{dt} = -(p + p_V) \nabla \cdot \mathbf{v} - \boldsymbol{\pi} : \nabla \mathbf{v} - \nabla \cdot \mathbf{q} + \sum_i \mathbf{J}_i \cdot \mathbf{F}_i. \quad (1.26)$$

Уравнение изменения энтальпии h

$$\rho \frac{dh}{dt} = \frac{dp}{dt} - p_V \nabla \cdot \mathbf{v} - \boldsymbol{\pi} : \nabla \mathbf{v} - \nabla \cdot \mathbf{q} + \sum_i \mathbf{J}_i \cdot \mathbf{F}_i. \quad (1.27)$$

Уравнения изменения температуры

$$\rho c_V \frac{dT}{dt} = -(p + p_V) \nabla \cdot \mathbf{v} - \boldsymbol{\pi} : \nabla \mathbf{v} - \nabla \cdot \mathbf{q} + \sum_i \mathbf{J}_i \cdot \mathbf{F}_i, \quad (1.28)$$

$$\rho c_p \frac{dT}{dt} = \frac{dp}{dt} - p_V \nabla \cdot \mathbf{v} - \boldsymbol{\pi} : \nabla \mathbf{v} - \nabla \cdot \mathbf{q} - \sum_i h_i \nabla \cdot \mathbf{J}_i + \sum_i \mathbf{J}_i \cdot \mathbf{F}_i + Q_r. \quad (1.29)$$

Обозначения

 h_i — удельная энтальпия компонента i .

Определения

Удельная энтальпия газовой смеси

$$h = \sum_i c_i h_i = u + \frac{p}{\rho}. \quad (1.30)$$

Удельная теплоемкость смеси при постоянном объеме

$$c_V = \left(\frac{\partial u}{\partial T} \right)_V. \quad (1.31)$$

Удельная теплоемкость смеси при постоянном давлении

$$c_p = \left(\frac{\partial h}{\partial T} \right)_p = \sum_i c_i (c_p)_i, \quad (c_p)_i = \left(\frac{\partial h_i}{\partial T} \right)_p. \quad (1.32)$$

Тепло, выделяющееся в смеси в результате химических реакций

$$Q_r = \sum_i h_i R_i. \quad (1.33)$$

Комментарии

1. Уравнение баланса внутренней энергии получается вычитанием соответствующих уравнений баланса кинетической и потенциальной энергии из уравнения баланса полной энергии. Для идеального газа бесструктурных молекул внутренняя энергия единицы объема совпадает с энергией хаотического движения частиц и складывается из кинетической энергии частиц в системе отсчета, движущейся со

среднемассовой скоростью \mathbf{v} . Для идеального газа, молекулы которого обладают внутренними степенями свободы, во внутреннюю энергию входит также сумма внутренней энергии молекул. Для плотных газов во внутреннюю энергию дополнительно включается потенциальная энергия взаимодействия частиц [4, 7].

2. Переход от уравнения (1.25) к (1.26) осуществляется с использованием уравнения сохранения массы смеси (1.6). В выражении для тензора Π учитывается вклад объемной вязкости, так что $P = p + p_V$ (см. гл. 8).

3. Переход от уравнения (1.26) к уравнению изменения энтальпии (1.27) производится с учетом определений (1.30) и (1.31).

4. Переход от уравнения (1.25) к уравнению изменения температуры в форме (1.28) производится с учетом определения (1.32) и уравнения баланса концентраций (1.7).

1.6. Уравнение баланса энтропии

$$\frac{\partial \rho s}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho s \mathbf{v} + \mathbf{J}_s) = \sigma. \quad (1.34)$$

Другая форма записи уравнения баланса энтропии [1]

$$\rho \frac{ds}{dt} + \nabla \cdot \mathbf{J}_s = \sigma. \quad (1.35)$$

Обозначения

s — энтропия единицы массы среды

ρs — плотность энтропии

$\rho s \mathbf{v}$ — вектор плотности конвективного потока энтропии

\mathbf{J}_s — вектор плотности потока энтропии в системе отсчета, движущейся со среднемассовой скоростью \mathbf{v}

σ — интенсивность источника энтропии, или *производство энтропии*

μ_i — химический потенциал компонента i .

Определение

Вектор плотности потока энтропии

$$\mathbf{J}_s = \frac{1}{T} \left(\mathbf{q} - \sum_{i=1}^N \mu_i \mathbf{J}_i \right). \quad (1.36)$$

Комментарии

1. Полное выражение для производства энтропии σ для многокомпонентной газовой смеси приводится в гл. 2.

2. Уравнение баланса энтропии является локальной формулировкой второго начала термодинамики. При этом выполняется условие

$$\sigma \geq 0. \quad (1.37)$$

На уровне кинетического описания это условие соответствует Н-теореме Больцмана, рассматриваемой в кинетической теории [4–8].

3. Интегрирование уравнения (1.35) по объему V с учетом неравенства (1.37) приводит к соотношению

$$\frac{dS}{dt} \geq - \int_{\Omega} \frac{\mathbf{q}}{T} d\Omega, \quad (1.38)$$

где $S = \int_V \rho s dV$ — полная энтропия системы. Неравенство (1.38) эквивалентно теореме Карно–Клаузиуса [1, 4].

4. Химический потенциал есть функция состояния, определяющая изменение термодинамических потенциалов при изменении числа частиц в системе.

1.7. Уравнения баланса для многокомпонентного ионизованного газа (плазмы)

Уравнения баланса для многокомпонентной газовой смеси могут применяться и для ионизованного газа (плазмы), если заряженные частицы (электроны, ионы), входящие в состав плазмы, рассматриваются наряду с нейтральными атомами и молекулами как компоненты газовой смеси [9–12]. При наличии электрического и магнитного полей выражение для силы \mathbf{F}_i , действующей на единицу массы среды, имеет вид

$$\mathbf{F}_i = \mathbf{X}_i + \frac{eZ_i}{m_i} (\mathbf{E} + [\mathbf{v}_i \times \mathbf{B}]). \quad (1.39)$$

Та часть силы, которая зависит от электрического и магнитного полей, называется обобщенной силой Лоренца.

Обозначения

\mathbf{E} — напряженность электрического поля

\mathbf{B} — магнитная индукция

ρ_e — плотность электрического заряда

Z_i — кратность заряда частиц компонента i : для нейтральных частиц

$Z_i = 0$, для электронов $Z_e = -1$

\mathbf{X}_i — сила неэлектромагнитной природы, отнесенная к массе частицы (для поля силы тяжести $\mathbf{X}_i = \mathbf{g}$, где \mathbf{g} — ускорение силы тяжести).

Система уравнений баланса

Система уравнений баланса для плазмы включает [9–12]

уравнение непрерывности

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} = -\nabla \cdot \rho_i \mathbf{v}_i + R_i, \quad (1.40)$$

уравнение сохранения плотности электрического заряда

$$\frac{\partial \rho_e}{\partial t} = -\nabla \cdot \rho_e \mathbf{v} - \nabla \cdot \mathbf{j}, \quad (1.41)$$

уравнение движения

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\nabla p - \nabla : \boldsymbol{\pi} + \rho_e \mathbf{E}' + [\mathbf{j} \times \mathbf{B}] + \sum_i \rho_i \mathbf{X}_i, \quad (1.42)$$

уравнение сохранения полной энергии плазмы

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \rho v^2 + \rho u \right) = -\nabla \cdot \left[\left(\frac{1}{2} \rho v^2 + \rho u \right) \mathbf{v} + \boldsymbol{\Pi} \cdot \mathbf{v} + \mathbf{q} \right] + \mathbf{j} \cdot \mathbf{E} + \sum_i \mathbf{J}_i \cdot \mathbf{X}_i. \quad (1.43)$$

Вместо уравнения сохранения полной энергии (1.43) используется также уравнение баланса внутренней энергии плазмы [10, 12]

$$\rho \frac{du}{dt} = -\boldsymbol{\Pi} : \nabla \mathbf{v} - \nabla \cdot \mathbf{q} + \mathbf{j} \cdot \mathbf{E}' + \sum_i \mathbf{J}_i \cdot \mathbf{X}_i. \quad (1.44)$$

Определения

Объемная плотность электрического заряда

$$\rho_e = \sum_{i=1}^N n_i e_i = e \sum_{i=1}^N n_i Z_i. \quad (1.45)$$

Плотность тока проводимости

$$\mathbf{j} = e \sum_{i=1}^N n_i Z_i \mathbf{V}_i = e \sum_{i=1}^N \frac{Z_i}{m_i} \mathbf{J}_i. \quad (1.46)$$

Напряженность электрического поля в системе отсчета, движущейся со среднemasсовой скоростью \mathbf{v} ,

$$\mathbf{E}' = \mathbf{E} + [\mathbf{v} \times \mathbf{B}]. \quad (1.47)$$

Комментарии

1. Величина R_i в уравнении неразрывности (1.40) помимо выражений, соответствующих образованию частиц соответствующего компонента в химических реакциях, включает члены, соответствующие появлению и исчезновению заряженных частиц (например, в результате реакций ионизации и рекомбинации).

2. При записи уравнения (1.41) предполагается, что при химических реакциях сохраняется квазинейтральность, т. е. $\sum_{i=1}^N \nu_{ji} Z_i = 0$.

3. Для квазинейтральной плазмы $\rho_e = 0$ и уравнение сохранения заряда принимает вид $\nabla \cdot \mathbf{j} = 0$.

4. Уравнение (1.43) следует из уравнения движения (1.42), если умножить его скалярно на среднemasсовую скорость \mathbf{v} . Переход к уравнению (1.44) осуществляется в результате вычитания из уравнения (1.43) уравнения баланса кинетической энергии. При записи уравнения (1.44) используется также уравнение сохранения массы смеси (1.6).

5. Член $\mathbf{j} \cdot \mathbf{E}'$ соответствует выделению джоулева тепла в плазме и возникает при представлении суммы $\sum_i \mathbf{J}_i \cdot \mathbf{F}_i$ в виде двух слагаемых, соответствующих независимому учету силы Лоренца и сил неэлектромагнитной природы.

1.8. Эквивалентная форма записи уравнений баланса импульса и энергии плазмы

Другая форма уравнений баланса импульса и энергии плазмы получается, если вместо членов, учитывающих наличие силы Лоренца, ввести в эти уравнения в явной форме члены, описывающие электромагнитное поле посредством уравнений Максвелла [1, 5, 13].

1.8.1. Уравнение баланса импульса

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{v} + \mathbf{K}) = -\nabla(\rho \mathbf{v} \mathbf{v} + \mathbf{\Pi} - \mathbf{T}) + \sum_i \rho_i \mathbf{X}_i. \quad (1.48)$$

1.8.2. Уравнение баланса полной энергии

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \rho v^2 + \rho u + w \right) = -\nabla \cdot \left[\left(\frac{1}{2} \rho v^2 + \rho u \right) \mathbf{v} + \mathbf{\Pi} \cdot \mathbf{v} + \mathbf{q} + \mathbf{S} \right] + \sum_i \mathbf{J}_i \cdot \mathbf{X}_i. \quad (1.49)$$

Обозначения

\mathbf{D} — вектор электрического смещения, $\mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E}$

\mathbf{H} — напряженность магнитного поля, $\mathbf{H} = \mathbf{B}/\mu_0$.

Определения

Вектор плотности импульса электромагнитного поля

$$\mathbf{K} = \frac{1}{c^2} \mathbf{S}. \quad (1.50)$$

Плотность энергии электромагнитного поля

$$w = \frac{1}{2} (\mathbf{E} \cdot \mathbf{D} + \mathbf{H} \cdot \mathbf{B}). \quad (1.51)$$

Плотность потока энергии электромагнитного поля (вектор Умова–Пойнтинга)

$$\mathbf{S} = [\mathbf{E} \times \mathbf{H}]. \quad (1.52)$$

Тензор напряжений электромагнитного поля (тензор натяжений Максвелла)

$$\mathbf{T} = \mathbf{E} \mathbf{D} + \mathbf{H} \mathbf{B} - w \delta. \quad (1.53)$$

Комментарии

1. Как указано ранее (см. введение, [1]), рассматриваются только среды с $\varepsilon = 1$ и $\mu = 1$.

2. При записи уравнения баланса в форме (1.48) и (1.49) используется система уравнений электромагнитного поля — *уравнения Максвелла*

$$\begin{aligned} [\nabla \times \mathbf{E}] &= -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}; \quad [\nabla \times \mathbf{H}] = \mathbf{j} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, \\ \nabla \cdot \mathbf{D} &= \rho_e, \quad \nabla \cdot \mathbf{B} = 0. \end{aligned} \quad (1.54)$$

Список литературы к главе 1

1. *де Гроот С., Мазур П.* Неравновесная термодинамика. — М.: Мир, 1964. — 456 с.
2. *Седов Л. И.* Механика сплошной среды: В 2 т. Т. 1. — М.: Наука, 1973. — 536 с.
3. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Гидродинамика. — М.: Наука, 1986. — 736 с.
4. *Гирифельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р.* Молекулярная теория газов и жидкостей. — М.: Изд-во иностр. лит., 1961. — 930 с.
5. *Пилюгин Н. Н., Тирский Г. А.* Динамика ионизованного излучающего газа. — М.: Изд-во МГУ, 1989. — 312 с.
6. *Жданов В. М., Алиевский М. Я.* Процессы переноса и релаксации в молекулярных газах. — М.: Наука, 1989. — 335 с.
7. *Ферцигер Дж., Капер Г.* Математическая теория процессов переноса в газах. — М.: Мир, 1976. — 556 с.
8. *Коган М. Н.* Динамика разреженного газа. — М.: Наука, 1967. — 440 с.
9. *Митчнер М., Кругер Ч.* Частично ионизованные газы. — М.: Мир, 1976. — 496 с.
10. *Жданов В. М.* Процессы переноса в многокомпонентной плазме. — М.: Физматлит, 2009. — 280 с.
11. *Zhdanov V. M.* Transport Properties in Multicomponent Plasma. — London; N. Y.: Taylor&Francis, 2002. — 296 p.
12. *Жданов В. М., Сон Э. Е.* Феноменологическое и кинетическое описание процессов переноса в низкотемпературной плазме // Энциклопедия низкотемпературной плазмы / Под ред. В. Е. Фортова. Т. 1. — М.: Наука, 2000. — С. 501–511.
13. *Куликовский А. Г., Любимов Г. А.* Магнитная гидродинамика. — М.: Физматгиз, 1962. — 246 с.

Глава 2

ТЕРМОДИНАМИКА НЕОБРАТИМЫХ ПРОЦЕССОВ И УРАВНЕНИЯ ГАЗОДИНАМИКИ

2.1. Термодинамика необратимых процессов

2.1.1. Основные понятия

Исходные положения термодинамики необратимых процессов (неравновесной термодинамики) изложены во втором томе Справочника [введение, [2]], где в качестве конкретных приложений рассмотрены скалярные неравновесные явления. Ниже приводятся выражения, описывающие векторные и тензорные явления переноса: диффузию, теплопроводность, термодиффузию и соответствующие перекрестные явления, а также сдвиговую вязкость [1–5]. Для сохранения общности в выражении для производства энтропии сохраняются члены, соответствующие скалярным явлениям: объемной вязкости и химическим реакциям.

В основе *термодинамики необратимых процессов* лежит уравнение баланса энтропии (уравнение (1.34)). Исходные положения термодинамики необратимых процессов базируются на нескольких основных утверждениях.

1. Выражение для производства энтропии σ (член в уравнении баланса энтропии, который определяет скорость возникновения энтропии в единице объема за счет внутренних диссипативных процессов в системе) имеет вид билинейной формы [1, 2]:

$$\sigma = \frac{1}{T} \sum_k \mathbf{J}_k \mathbf{X}_k, \quad (2.1)$$

где \mathbf{J}_k — вектор плотности потока какой-либо величины (например, плотность приведенного теплового потока \mathbf{J}_q , плотность массового диффузионного потока \mathbf{J}_i , плотность потока импульса, или тензор вязких напряжений $\boldsymbol{\pi}$, скорость химической реакции J_j); \mathbf{X}_k — величина, пропорциональная градиенту интенсивной переменной состояния (например, градиентам температуры, химического потенциала, тензору скоростей сдвига, а также внешним силам или градиентам потенциала). Этой величиной может быть также разность термодинамических

переменных состояния, например химическое сродство A_k . Величины X_k носят название *термодинамических сил*.

2. Потоки J_k и термодинамические силы X_j связаны линейными соотношениями [1]:

$$J_k = \sum_{j=1}^n L_{kj} X_j, \quad (2.2)$$

где L_{kj} — феноменологические, или кинетические коэффициенты матрицы Онзагера ранга n . Выполняется принцип симметрии Онзагера: $L_{kj} = L_{jk}$, т. е. матрица Онзагера является симметричной.

Д о п у щ е н и я

1. Рассматриваются состояния газовой смеси, слабо отклоняющиеся от локального термодинамического равновесия.

2. Предполагается слабое изменение макроскопических параметров смеси на расстояниях порядка характерной средней длины свободного пробега частиц в газе.

3. Характерные времена релаксации энергии внутренних степеней свободы молекул имеют порядок характерного времени поступательной релаксации, которое много меньше характерного газодинамического времени.

4. При записи линейных соотношений для скорости химических реакций рассматриваются состояния, слабо отклоняющиеся от состояния химического равновесия.

2.1.2. Линейные феноменологические соотношения между потоками и термодинамическими силами

Производство энтропии [1]

$$\sigma = -\frac{1}{T^2} J_q \cdot \nabla T - \frac{1}{T} \sum_{i=1}^N J_i \cdot [(\nabla \mu_i)_T - F_i] - \frac{1}{T} \pi : S - \frac{1}{T} p_V \nabla \cdot \mathbf{v} - \frac{1}{T} \sum_{k=1}^r J_k A_k. \quad (2.3)$$

О б о з н а ч е н и я

r — число химических реакций, протекающих в смеси

J_i — скорость химической реакции

μ_i — химический потенциал компонента i для единицы массы

h_i — парциальная удельная энтальпия компонента i

$(\nabla \mu_i)_T$ — градиент химического потенциала компонента i при $T = \text{const}$.

О п р е д е л е н и я

Вектор плотности приведенного теплового потока

$$J_q = q - \sum_{i=1}^N h_i J_i. \quad (2.4)$$

Химическое сродство реакции k [1]

$$A_k = \sum_{j=1}^N \nu_{kj} \mu_j, \quad k = 1, 2, \dots, r. \quad (2.5)$$

Компоненты тензора скоростей сдвига \mathbf{S}

$$S_{rs} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_r}{\partial x_s} + \frac{\partial v_s}{\partial x_r} \right) - \frac{1}{3} \delta_{rs} \nabla \cdot \mathbf{v}. \quad (2.6)$$

Комментарий

Для смеси идеальных газов бесструктурных частиц химический потенциал компонента i на единицу массы с точностью до константы определяется выражением [6]

$$\mu_i = \frac{kT}{m_i} \ln \left[n_i \left(\frac{m_i}{2\pi kT} \right)^{3/2} \right], \quad (2.7)$$

при этом

$$(\nabla \mu_i)_T = \frac{1}{m_i n_i} \nabla p_i. \quad (2.8)$$

Ниже приводятся линейные феноменологические соотношения для векторных, тензорных и скалярных величин с использованием нескольких вариантов записи исходного выражения для производства энтропии.

2.1.3. Векторные явления (перенос массы и энергии)

Вариант 1

Производство энтропии

$$\sigma = -\frac{1}{T^2} \mathbf{J}_q \cdot \nabla T - \frac{1}{T} \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{J}_i}{\rho_i} p \mathbf{d}_i. \quad (2.9)$$

Комментарий

1. В выражении (2.9) используется только та часть производства энтропии, которая связана с векторными потоками \mathbf{J}_i и \mathbf{J}_q .

2. Для получения результатов, адекватных выражениям кинетической теории (см. гл. 4), во втором члене общего выражения для производства энтропии (2.3) вместо величины

$$(\nabla \mu_i)_T - \mathbf{F}_i$$

вводится термодинамическая сила

$$\mathbf{X}_i = -p \mathbf{d}_i = -\rho_i \left[(\nabla \mu_i)_T - \mathbf{F}_i - \frac{1}{\rho} \left(\nabla p - \sum_k^N \rho_k \mathbf{F}_k \right) \right]. \quad (2.10)$$

Дополнительный член в квадратных скобках не вносит вклада в производство энтропии из-за условия

$$\sum_{i=1}^N \mathbf{J}_i = 0. \quad (2.11)$$

3. Предполагается выполнение соотношения Гиббса–Дюгема [1]

$$\sum_{i=1}^N \rho_i (\nabla \mu_i)_T = \nabla p, \quad (2.12)$$

поэтому термодинамические силы $-p \mathbf{d}_i$ удовлетворяют условию

$$\sum_{i=1}^N p \mathbf{d}_i = 0. \quad (2.13)$$

4. Для смеси идеальных газов выражение для \mathbf{d}_i в выражении (2.10) с учетом (2.7) принимает форму, известную в кинетической теории газов [2, 7, 8]:

$$\mathbf{d}_i = \nabla \frac{n_i}{n} + \left(\frac{n_i}{n} - \frac{\rho_i}{\rho} \right) \nabla \ln p - \frac{1}{p} \left(\rho_i \mathbf{F}_i - \sum_{k=1}^N \rho_k \mathbf{F}_k \right). \quad (2.14)$$

Потоки

$$\mathbf{J}_i / \rho_i, \quad \mathbf{J}_q.$$

Термодинамические силы

$$\mathbf{X}_j = -p \mathbf{d}_j, \quad \mathbf{X}_q = -\frac{1}{T} \nabla T.$$

Линейные соотношения

$$\mathbf{J}_q = -L_{qq} \frac{1}{T} \nabla T - \sum_{j=1}^N L_{qj} p \mathbf{d}_j, \quad (2.15)$$

$$\frac{\mathbf{J}_i}{\rho_i} = -L_{iq} \frac{1}{T} \nabla T - \sum_{j=1}^N L_{ij} p \mathbf{d}_j, \quad (2.16)$$

где L_{iq}, L_{ij} — коэффициенты матрицы Онзагера.

Соотношения взаимности Онзагера

$$\begin{aligned} L_{iq} &= L_{qi}; \quad i = 1, 2, \dots, N, \\ L_{ij} &= L_{ji}; \quad i, j = 1, 2, \dots, N. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Вариант 2

Производство энтропии

Производство энтропии удобно представить в виде

$$\sigma = -\frac{1}{T^2} \mathbf{J}_q \cdot \nabla T - \frac{1}{T} \sum_{i=1}^{N-1} \left(\frac{\mathbf{J}_i}{\rho_i} - \frac{\mathbf{J}_N}{\rho_N} \right) \cdot p \mathbf{d}_i, \quad (2.18)$$

так как из условия Гиббса–Дюгема (2.12) из N диффузионных термодинамических сил $p \mathbf{d}_k$ лишь $N - 1$ соответствующих величин оказываются независимыми.

Линейные соотношения

$$\mathbf{J}_q = -\tilde{L}_{qq} \frac{1}{T} \nabla T - \sum_{k=1}^{N-1} \tilde{L}_{qk} p \mathbf{d}_k, \quad (2.19)$$

$$\frac{\mathbf{J}_i}{\rho_i} - \frac{\mathbf{J}_N}{\rho_N} = -\tilde{L}_{iq} \frac{1}{T} \nabla T - \sum_{k=1}^{N-1} \tilde{L}_{ik} p \mathbf{d}_k. \quad (2.20)$$

Связь коэффициентов \tilde{L} и L

$$\tilde{L}_{iq} = L_{iq} - L_{Nq}, \quad \tilde{L}_{ik} = (L_{ik} - L_{Nk}) - (L_{iN} - L_{NN}).$$

Комментарии

1. Переход от выражения (2.9) к выражению (2.18) происходит в результате исключения из суммирования по i члена, соответствующего $i = N$.

2. Коэффициенты \tilde{L} , также как коэффициенты матрицы Онзагера L , удовлетворяют соотношениям взаимности Онзагера.

Вариант 3

Билинейность производства энтропии гарантирует возможность выбора в качестве потоков и соответствующих термодинамических сил любого из сомножителей в выражении (2.18).

Потоки

$$-p \mathbf{d}_i; \quad -\frac{1}{T} \nabla T.$$

Термодинамические силы

$$\left(\frac{\mathbf{J}_k}{\rho_k} - \frac{\mathbf{J}_N}{\rho_N} \right); \quad \mathbf{J}_q.$$

Линейные соотношения [5, 9, 10]

$$-p \mathbf{d}_i = \Omega_{iq} \mathbf{J}_q + \sum_{k=1}^{N-1} \Omega_{ik} \left(\frac{\mathbf{J}_k}{\rho_k} - \frac{\mathbf{J}_N}{\rho_N} \right), \quad (2.21)$$

$$-\frac{1}{T} \nabla T = \Omega_{qq} \mathbf{J}_q + \sum_{k=1}^{N-1} \Omega_{qk} \left(\frac{\mathbf{J}_k}{\rho_k} - \frac{\mathbf{J}_N}{\rho_N} \right). \quad (2.22)$$

Соотношения взаимности Онзагера

$$\begin{aligned} \Omega_{iq} &= \Omega_{qi} \quad (i = 1, 2, \dots, N-1), \\ \Omega_{ik} &= \Omega_{ki} \quad (i, k = 1, 2, \dots, N-1). \end{aligned} \quad (2.23)$$

Еще одна форма линейных соотношений между потоками и силами получается, если выразить поток \mathbf{J}_q из уравнения (2.22) и подставить его выражение в (2.21):

$$-p\mathbf{d}_i = \Lambda_{iq} \frac{1}{T} \nabla T + \sum_{k=1}^{N-1} \Lambda_{ik} \left(\frac{\mathbf{J}_k}{\rho_k} - \frac{\mathbf{J}_N}{\rho_N} \right), \quad (2.24)$$

$$\mathbf{J}_q = -\Lambda_{qq} \frac{1}{T} \nabla T + \sum_{k=1}^{N-1} \Lambda_{qk} \left(\frac{\mathbf{J}_k}{\rho_k} - \frac{\mathbf{J}_N}{\rho_N} \right). \quad (2.25)$$

Связь Λ и Ω

$$\Lambda_{qq} = \frac{1}{\Omega_{qq}}; \quad \Lambda_{iq} = -\frac{\Omega_{iq}}{\Omega_{qq}}; \quad \Lambda_{ik} = \Omega_{ik} - \frac{\Omega_{iq} \Omega_{qk}}{\Omega_{qq}}. \quad (2.26)$$

Коэффициенты Λ , также как коэффициенты Ω , удовлетворяют соотношениям взаимности Онзагера.

Комментарий

Соотношения (2.24) можно представить в виде, при котором уравнения для определения диффузионных потоков принимают форму уравнений Стефана–Максвелла [2, 11]. Из условия (2.13) следует

$$\sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^N \Lambda_{ik} \left(\frac{\mathbf{J}_k}{\rho_k} - \frac{\mathbf{J}_N}{\rho_N} \right) = 0,$$

что возможно лишь при выполнении условий

$$\sum_{i=1}^N \Lambda_{ik} = \sum_{k=1}^N \Lambda_{ki} = 0 \quad \text{или} \quad \Lambda_{ii} = -\sum_{k \neq i}^N \Lambda_{ki}.$$

В результате вместо соотношений (2.24) записываются уравнения

$$p\mathbf{d}_i = -\Lambda_{iq} \frac{1}{T} \nabla T - \sum_{k \neq i}^N \Lambda_{ik} \left(\frac{\mathbf{J}_k}{\rho_k} - \frac{\mathbf{J}_i}{\rho_i} \right), \quad (2.27)$$

что находится в соответствии с результатами кинетической теории [2, 5] (см. гл. 4).

2.1.4. Тензорные явления (перенос импульса)

Полный тензор напряжений в газовой смеси Π

$$\Pi = (p + p_V) \delta + \pi. \quad (2.28)$$

Комментарий

В соответствии с принципом Кюри [1] потоки и силы различной тензорной размерности не могут быть связаны между собой. Поскольку π является тензором второго ранга, а p_V — скаляром, линейные соотношения для них рассматриваются отдельно.

Производство энтропии

$$\sigma = -\frac{1}{T} \boldsymbol{\pi} : \mathbf{S}, \quad (2.29)$$

где $\boldsymbol{\pi}$ — поток; \mathbf{S} — термодинамическая сила.

Линейное соотношение

$$\boldsymbol{\pi} = -K\mathbf{S} = -2\eta\mathbf{S} \quad \text{или} \quad \pi_{rs} = -\eta \left(\frac{\partial v_r}{\partial x_s} + \frac{\partial v_s}{\partial x_r} - \frac{2}{3} \delta_{rs} \nabla \cdot \mathbf{v} \right). \quad (2.30)$$

Объемная вязкость и скорость химических реакций

Вместе с выражением для p_V в одну подсистему скалярных явлений входит скорость химических реакций J_j .

Производство энтропии

$$\sigma = -\frac{1}{T} p_V \nabla \cdot \mathbf{v} - \frac{1}{T} \sum_{k=1}^r J_k A_k^{\text{ch}}. \quad (2.31)$$

Потоки

$$p_V, \quad J_j.$$

Термодинамические силы

$$\nabla \cdot \mathbf{v}, \quad A_m^{\text{ch}}.$$

Линейные соотношения

$$p_V = -\ell_{VV} \nabla \cdot \mathbf{v} - \sum_{m=1}^r \ell_{Vm} A_m^{\text{ch}}, \quad (2.32)$$

$$J_j = -\ell_{jV} \nabla \cdot \mathbf{v} - \sum_{m=1}^r \ell_{jm} A_m^{\text{ch}} \quad (j = 1, 2, \dots, r). \quad (2.33)$$

Соотношения взаимности Онзагера

$$\ell_{jm} = \ell_{mj}. \quad (2.34)$$

Комментарий

Коэффициенты ℓ_{VV} , ℓ_{Vm} , ℓ_{jV} , ℓ_{jm} — коэффициенты матрицы Онзагера — учитывают явления объемной вязкости и вклад химических реакций.

2.2. Уравнения газодинамики

Рассмотренные выше линейные соотношения термодинамики необратимых процессов используются для записи выражений для соответствующих потоков и источников членов в уравнениях баланса массы, импульса и энергии, которые рассматривались в гл. 1. Эти уравнения дополняются термическим и калорическим уравнениями состояния, которые замыкают систему уравнений газодинамики, справедливую в условиях слабого отклонения системы от локального

термодинамического равновесия. Ниже приводятся соответствующие системы уравнений газодинамики для однокомпонентного газа, бинарной и многокомпонентной газовых смесей.

2.2.1. Однокомпонентный газ с вязкостью и теплопроводностью

Назначение модели

Получение замкнутой системы уравнений газодинамики однокомпонентного газа с вязкостью и теплопроводностью.

Допущения

1. Химические реакции отсутствуют.
2. Справедливы ограничения, определяющие область применимости термодинамики необратимых процессов для описания состояния газа (см. разд. 2.1).
3. Для получения замкнутой системы уравнений газодинамики используются линейные соотношения термодинамики необратимых процессов для тензора вязких напряжений, вектора плотности теплового потока и вклада в скалярную часть тензора давлений, соответствующего объемной вязкости.

Линейное соотношение для тензора вязких напряжений (закон Ньютона)

$$\pi = -K\mathbf{S} = -2\eta\mathbf{S}. \quad (2.35)$$

Линейное соотношение для вектора плотности теплового потока (закон Фурье)

$$\mathbf{J}_q = -L_{qq}\frac{1}{T}\nabla T = -\lambda\nabla T. \quad (2.36)$$

Линейное соотношение для объемной вязкости

$$p_V = -\ell_{VV}\nabla \cdot \mathbf{v} = -\eta_V\nabla \cdot \mathbf{v}. \quad (2.37)$$

Комментарии

1. Условие $\sigma \geq 0$ обеспечивает выполнение условий $\eta > 0$, $\eta_V > 0$, $\lambda > 0$.

2. Для идеального газа бесструктурных молекул объемная вязкость отсутствует ($\eta_V = 0$).

Уравнения газодинамики однокомпонентного газа

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot \rho \mathbf{v}, \quad (2.38)$$

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\nabla p + \nabla \eta_V \nabla \cdot \mathbf{v} + 2\nabla \cdot \eta \mathbf{S} + \rho \mathbf{F}, \quad (2.39)$$

$$\rho \frac{du}{dt} = -p\nabla \cdot \mathbf{v} + \nabla \cdot \lambda \nabla T + 2\eta(\mathbf{S} : \mathbf{S}) + \eta_V(\nabla \cdot \mathbf{v})^2. \quad (2.40)$$

Если коэффициенты переноса η , η_V и λ считаются постоянными величинами (или слабо зависящими от координат), уравнения газодинамики принимают вид

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot \rho \mathbf{v}, \quad (2.41)$$

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\nabla p + \eta \Delta \mathbf{v} + \left(\frac{1}{3} \eta + \eta_V \right) \nabla \nabla \cdot \mathbf{v} + \rho \mathbf{F}, \quad (2.42)$$

$$\rho \frac{du}{dt} = -p \nabla \cdot \mathbf{v} + \lambda \Delta T + 2\eta (\mathbf{S} : \mathbf{S}) + \eta_V (\nabla \cdot \mathbf{v})^2. \quad (2.43)$$

Комментарий

Уравнения газодинамики дополняются термическим и калорическим уравнениями состояния (см. введение, [2])

$$p = p(\rho, T), \quad u = u(\rho, T). \quad (2.44)$$

Для идеального газа

$$p = \rho \frac{k}{m} T = \rho \frac{R}{M} T, \quad du = c_V(T) dT, \quad (2.45)$$

где $c_V(T)$ — удельная теплоемкость при постоянном объеме.

Для атомарного газа частиц массой m

$$c_V = \frac{3}{2} \frac{k}{m}. \quad (2.46)$$

2.2.2. Бинарная газовая смесь

Назначение модели

Получение замкнутой системы уравнений газодинамики для двухкомпонентной газовой смеси.

Допущения

1. Химические реакции отсутствуют.
2. Справедливы ограничения, определяющие область применимости термодинамики необратимых процессов для описания состояния газа.
3. Для получения замкнутой системы уравнений газодинамики бинарной смеси, записываемой в массовых переменных, используются линейные соотношения для массового диффузионного потока \mathbf{J}_i , тензора напряжений $\mathbf{\Pi}$ и вектора плотности теплового потока \mathbf{q} .
4. Выражения, получаемые методами термодинамики необратимых процессов для диффузионных скоростей $\mathbf{V}_i = \mathbf{J}_i / \rho_i$, связывают их с термодинамической силой $p \mathbf{d}_i$, записываемой в молярных переменных. По этой причине ниже рассматриваются выражения для массовых и молярных диффузионных потоков (с использованием как массовых, так и молярных концентраций компонентов) и устанавливается связь между ними.

О п р е д е л е н и я

Вектор плотности массового диффузионного потока компонента i ($i = 1, 2$)

$$\mathbf{J}_1 = \rho_1(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}) = \rho c_1 c_2(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2); \quad \mathbf{J}_2 = -\mathbf{J}_1. \quad (2.47)$$

Вектор плотности молярного диффузионного потока компонента i ($i = 1, 2$)

$$\mathbf{J}_1^M = n_1(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}^M) = n x_1 x_2(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2); \quad \mathbf{J}_2^M = -\mathbf{J}_1^M. \quad (2.48)$$

Среднемассовая скорость смеси

$$\mathbf{v} = c_1 \mathbf{v}_1 + c_2 \mathbf{v}_2.$$

Среднемолярная скорость смеси

$$\mathbf{v}^M = x_1 \mathbf{v}_1 + x_2 \mathbf{v}_2.$$

Массовая концентрация компонента i ($i = 1, 2$)

$$c_i = \rho_i / \rho.$$

Молярная доля компонента i ($i = 1, 2$)

$$x_i = n_i / n.$$

Комментарии

1. Выражения для векторов плотности потока записываются лишь для компонента 1, поскольку потоки компонента 2 выражаются с помощью соотношений

$$\mathbf{J}_2 = -\mathbf{J}_1; \quad \mathbf{J}_1^m = -\mathbf{J}_2^m. \quad (2.49)$$

2. Для массовых и молярных долей первого и второго компонентов имеют место соотношения

$$c_1 + c_2 = 1; \quad x_1 + x_2 = 1.$$

3. Концентрации c_i и x_i ($i = 1, 2$) связаны соотношениями

$$c_i = \frac{m_i x_i}{\sum_{k=1}^2 m_k x_k}; \quad c_1 c_2 = m_1 m_2 \frac{n^2}{\rho^2} x_1 x_2. \quad (2.50)$$

Линейные соотношения для векторов плотности диффузионных потоков

Вектор плотности молярного диффузионного потока первого компонента ($i = 1$)

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_1^M &= n x_1 x_2 (\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2) = -n x_1 x_2 \left(L_{11} p \mathbf{d}_1 + L_{1q} \frac{1}{T} \nabla T \right) = \\ &= -n \mathcal{D}_{12} \left(\nabla x_1 + k_p \frac{1}{p} \nabla p + k_T \frac{1}{T} \nabla T \right). \end{aligned} \quad (2.51)$$

Вектор плотности массового диффузионного потока первого компонента \mathbf{J}_1 (в переменных x_1)

$$\mathbf{J}_1 = -m_1 m_2 \frac{n^2}{\rho} \mathcal{D}_{12} \left(\nabla x_1 + k_p \frac{1}{p} \nabla p + k_T \frac{1}{T} \nabla T \right). \quad (2.52)$$

Вектор плотности массового диффузионного потока первого компонента \mathbf{J}_1 (в переменных c_1)

$$\mathbf{J}_1 = -\rho \mathcal{D}_{12} \left(\nabla c_1 + k_p^m \frac{1}{p} \nabla p + k_T^m \frac{1}{T} \nabla T \right). \quad (2.53)$$

Связь коэффициентов переноса с химическим потенциалом

Коэффициент бинарной диффузии

$$\mathcal{D}_{12} = \rho_1 x_1 x_2 L_{11} \left(\frac{\partial \mu_1}{\partial x_1} \right)_{T,p}. \quad (2.54)$$

Бародиффузионное отношение k_p

$$\rho \mathcal{D}_{12} k_p = \rho_1 x_1 x_2 L_{11} \left[\left(\frac{\partial \mu_1}{\partial p} \right)_{T,x_1} - \frac{1}{\rho} \right]. \quad (2.55)$$

Бародиффузионный фактор α_p

$$\alpha_p = \frac{k_p}{x_1 x_2} = \frac{k_p^m}{c_1 c_2}. \quad (2.56)$$

Термодиффузионное отношение k_T

$$\rho \mathcal{D}_{12} k_T = x_1 x_2 L_{1q}. \quad (2.57)$$

Термодиффузионный фактор α_T

$$\alpha_T = \frac{k_T}{x_1 x_2} = \frac{k_T^m}{c_1 c_2}. \quad (2.58)$$

Комментарии

1. Выражение для вектора плотности молярного диффузионного потока (2.51) следует из линейного соотношения (2.20). Выражение для вектора плотности массового диффузионного потока следует из соотношения

$$\mathbf{J}_1 = m_1 m_2 \frac{n^2}{\rho} \mathbf{J}_1^M. \quad (2.59)$$

2. Для смеси идеальных газов

$$\mathcal{D}_{12} = p x_1 x_2 L_{11}, \quad \alpha_p = \frac{m_2 - m_1}{m_1 x_1 + m_2 x_2} = (m_2 - m_1) \left(\frac{c_1}{m_1} + \frac{c_2}{m_2} \right). \quad (2.60)$$

3. Формулы (2.54)–(2.58) представляют собой общие выражения для коэффициентов переноса. Конкретные выражения для коэффициентов переноса приводятся в гл. 5, 7 и 12.

Тензор вязких напряжений

Линейные соотношения для тензора вязких напряжений и для объемной вязкости смеси сохраняют тот же вид, что и в случае однокомпонентного газа:

$$\boldsymbol{\pi} = -2\eta\mathbf{S}, \quad (2.61)$$

$$p_V = -\eta_V \nabla \cdot \mathbf{v}, \quad (2.62)$$

где η и η_V — коэффициенты сдвиговой и объемной вязкости смеси.

Линейные соотношения для вектора плотности теплового потока

$$\mathbf{q} = \mathbf{J}_q + \sum_{k=1}^2 h_k \mathbf{J}_k \quad \text{или} \quad \mathbf{q} = \mathbf{J}_q + (h_1 - h_2) \mathbf{J}_1. \quad (2.63)$$

Для смеси идеальных газов

$$\mathbf{q} = \mathbf{J}_q + \frac{5}{2} kT \frac{m_2 - m_1}{m_1 m_2} \mathbf{J}_1; \quad h_i = \frac{5}{2} \frac{kT}{m_i} \quad (i = 1, 2). \quad (2.64)$$

Линейное соотношение для \mathbf{J}_q

$$\mathbf{J}_q = -L_{qq} \frac{1}{T} \nabla T - L_{q1} p \mathbf{d}_1 = -\lambda' \nabla T - p \alpha_T \mathcal{D}_{12} \mathbf{d}_1$$

или

$$\mathbf{J}_q = -\lambda' \nabla T - p \alpha_T \mathcal{D}_{12} \left(\nabla x_1 + \alpha_p x_1 x_2 \frac{1}{p} \nabla p \right). \quad (2.65)$$

Другая форма записи \mathbf{J}_q

$$\mathbf{J}_q = -\lambda \nabla T + p \alpha_T x_1 x_2 (\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2) = -\lambda \nabla T + \frac{\rho p}{n^2 m_1 m_2} \alpha_T \mathbf{J}_1. \quad (2.66)$$

Связь коэффициентов теплопроводности с коэффициентами матрицы Онзагера

$$\lambda = \lambda' - \frac{p}{T} \mathcal{D}_{12} (\alpha_T)^2 x_1 x_2; \quad \lambda' = \frac{L_{qq}}{T}. \quad (2.67)$$

Обозначения

\mathbf{J}_q — вектор плотности приведенного теплового потока

λ' — «мгновенный» коэффициент теплопроводности смеси

λ — «истинный» коэффициент теплопроводности смеси.

Комментарий

Выражение для \mathbf{J}_q в форме (2.66) является более предпочтительным при конкретном использовании, поскольку в отличие от «мгновенного» коэффициента λ' «истинный» коэффициент теплопроводности λ

поддается прямому экспериментальному измерению. Это связано с тем, что наличие градиента температуры в смеси приводит к переносу массы компонента за счет термодиффузии, и стационарное состояние устанавливается лишь после того, как поток термодиффузии уравнивается диффузионным потоком за счет возникшего градиента концентрации. В этих условиях вектор плотности диффузионного потока \mathbf{J}_1 обращается в нуль, и плотность теплового потока определяется выражением (2.66), соответствующим закону Фурье с «истинным» коэффициентом теплопроводности (2.67).

Уравнения газодинамики бинарной смеси

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot \rho \mathbf{v}, \quad (2.68)$$

$$\rho \frac{dc_1}{dt} = -\nabla \mathbf{J}_1; \quad c_1 + c_2 = 1, \quad (2.69)$$

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\nabla p + \nabla \eta_V \nabla \cdot \mathbf{v} + 2\nabla \cdot \eta \mathbf{S} + \rho [c_1 \mathbf{F}_1 + (1 - c_1) \mathbf{F}_2], \quad (2.70)$$

$$\rho \frac{du}{dt} = -p \nabla \cdot \mathbf{v} + 2\eta (\nabla \mathbf{v} : \nabla \mathbf{v}) + \eta_V (\nabla \cdot \mathbf{v})^2 + \nabla \cdot \lambda \nabla T + \\ + \nabla \cdot \beta \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_1 \cdot (\mathbf{F}_1 - \mathbf{F}_2), \quad (2.71)$$

$$\mathbf{J}_1 = -\mathbf{J}_2 = -\rho \mathcal{D}_{12} \left(\nabla c_1 + \alpha_p c_1 c_2 \frac{1}{p} \nabla p + \alpha_T c_1 c_2 \frac{1}{T} \nabla T \right), \quad (2.72)$$

$$\beta = (h_1 - h_2) - \frac{\rho p}{n^2 m_1 m_2} \alpha_T. \quad (2.73)$$

Для смеси идеальных газов

$$\beta = \frac{5}{2} kT \frac{m_2 - m_1}{m_1 m_2} - \frac{\rho kT}{n m_1 m_2} \alpha_T. \quad (2.74)$$

Комментарии

1. Уравнения (2.68)–(2.70) переходят в уравнения газодинамики однокомпонентного газа (2.41)–(2.43), если положить $c_1 = 1$ и $m_1 = m_2$.

2. Уравнения газодинамики дополняются термическим и калорическим уравнениями состояния:

$$p = p(\rho, c_1, T); \quad u = u(p, \rho, c_1). \quad (2.75)$$

Для смеси идеальных газов

$$p = \frac{\rho}{m} kT, \quad \frac{1}{m} = \frac{c_1}{m_1} + \frac{c_2}{m_2}, \quad du = c_V(T, c_1) dT. \quad (2.76)$$

2.2.3. Многокомпонентная газовая смесь

Назначение модели

Получение замкнутой системы уравнений газодинамики для многокомпонентной газовой смеси.

Д о п у щ е н и я

1. Газовая смесь образована из молекул N компонентов ($i = 1, 2, \dots, N$). Химические реакции отсутствуют.

2. Справедливы ограничения, определяющие область применимости термодинамики необратимых процессов для описания состояния газа.

3. Для получения замкнутой системы уравнений газодинамики многокомпонентной смеси используются линейные соотношения для массового диффузионного потока \mathbf{J}_i , тензора напряжений $\mathbf{\Pi}$ и вектора плотности теплового потока \mathbf{q} .

Линейные соотношения для вектора плотностей диффузионных потоков

Вектор плотности массового диффузионного потока компонента i \mathbf{J}_i

$$\mathbf{J}_i = -\rho_i \left(\sum_k D_{ik} \mathbf{d}_k + D_{Ti} \frac{1}{T} \nabla T \right) = -\rho_i \sum_k D_{ik} \left(\mathbf{d}_k + k_{Tk} \frac{1}{T} \nabla T \right). \quad (2.77)$$

Связь коэффициентов диффузии и термодиффузии с коэффициентами матрицы Онзагера

Коэффициент диффузии многокомпонентной смеси

$$D_{ik} = p L_{ik}. \quad (2.78)$$

Коэффициент термодиффузии многокомпонентной смеси

$$D_{Ti} = L_{iq}. \quad (2.79)$$

К о м м е н т а р и и

1. Линейные соотношения (2.77) следуют из общих соотношений (2.16). Связь между коэффициентами D_{ik} , D_{Ti} и феноменологическими коэффициентами L_{ik} и L_{iq} устанавливается после того как эти соотношения разрешаются относительно плотности массового диффузионного потока \mathbf{J}_i с учетом дополнительного условия $\sum_i \mathbf{J}_i = 0$.

2. Коэффициенты D_{ij} и D_{Ti} удовлетворяют условиям

$$D_{ik} = D_{ki}; \quad \sum_i \frac{\rho_i}{\rho} D_{ik} = 0; \quad \sum_i \frac{\rho_i}{\rho} D_{Ti} = 0, \quad (2.80)$$

поэтому для N -компонентной смеси имеется $(1/2) N(N-1)$ независимых коэффициентов диффузии и $N-1$ независимых коэффициентов термодиффузии.

3. Термодиффузионные отношения вводятся с помощью соотношений

$$\sum_i D_{ik} k_{Tk} = D_{Ti}; \quad \sum_i k_{Ti} = 0 \quad (i = 1, \dots, N). \quad (2.81)$$

Соотношения Стефана–Максвелла

Вектор плотности массовых диффузионных потоков \mathbf{J}_k может быть получен также в результате решения системы уравнений Стефана–Максвелла (2.27)

$$-p \mathbf{d}_i = \Lambda_{iq} \frac{1}{T} \nabla T + \sum_{k \neq i}^N \Lambda_{ik} \left(\frac{\mathbf{J}_k}{\rho_k} - \frac{\mathbf{J}_i}{\rho_i} \right) \quad (2.82)$$

с использованием дополнительного условия $\sum_{i=1}^N \mathbf{J}_i = 0$.

Комментарий

Сравнение с результатами кинетической теории газовых смесей дает следующую связь между феноменологическими и кинетическими коэффициентами [5, 10, 12]:

$$\Lambda_{iq} = p k_{Ti}; \quad \Lambda_{ik} = \Lambda_{ki} = -\frac{m_i n_k}{n^2 [\mathcal{D}_{ik}]_1} (1 - \Delta_{ik}), \quad (2.83)$$

где $[\mathcal{D}_{ik}]_1$ — коэффициент бинарной диффузии для i -го и k -го компонентов, определяемый в первом приближении теории Чепмена–Энскога [7]; Δ_{ik} — поправка к коэффициенту бинарной диффузии в следующих приближениях теории (см. гл. 4).

Тензор вязких напряжений

Линейные соотношения для тензора вязких напряжений и для объемной вязкости многокомпонентной смеси сохраняют тот же вид, что и в случае однокомпонентного газа:

$$\boldsymbol{\pi} = -2\mathbf{S}, \quad (2.84)$$

$$p_V = -\eta_V \nabla \cdot \mathbf{v}. \quad (2.85)$$

Линейные соотношения для вектора плотности теплового потока

$$\mathbf{q} = \mathbf{J}_q + \sum_{i=1}^N h_i \mathbf{J}_i, \quad (2.86)$$

$$\mathbf{J}_q = -\lambda' \nabla T - p \sum_{i=1}^N D_{Ti} \mathbf{d}_i. \quad (2.87)$$

Другая форма записи \mathbf{J}_q

$$\mathbf{J}_q = -\lambda \nabla T + p \sum_{i=1}^N k_{Ti} \frac{\mathbf{J}_i}{\rho_i} = -\lambda \nabla T + p \sum_{i=1}^N k_{Ti} \mathbf{v}_i. \quad (2.88)$$

Для идеального газа вектор плотности полного теплового потока равен

$$\mathbf{q} = -\lambda \nabla T + p \sum_i \left(k_{Ti} + \frac{5}{2} x_i \right) \mathbf{v}_i. \quad (2.89)$$

Связь между коэффициентом теплопроводности и коэффициентами матрицы Онзагера

$$\lambda' = \frac{L_{qq}}{T}; \quad \lambda = \lambda' - nk \sum_i k_{Ti} D_{Ti}. \quad (2.90)$$

Комментарий

Переход от формулы (2.87) к (2.88) производится с использованием соотношений (2.77)–(2.79).

Уравнения газодинамики многокомпонентной смеси

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot \rho \mathbf{v}, \quad (2.91)$$

$$\rho \frac{dc_i}{dt} = -\nabla \cdot \mathbf{J}_i; \quad \sum_{i=1}^N c_i = 1, \quad (2.92)$$

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\nabla p + \nabla \eta_V \nabla \cdot \mathbf{v} + 2\nabla \cdot \eta \mathbf{S} + \rho \sum_i c_i \mathbf{F}_i, \quad (2.93)$$

$$\begin{aligned} \rho \frac{du}{dt} = & -p \nabla \cdot \mathbf{v} + 2\eta(\nabla \mathbf{v} : \nabla \mathbf{v}) + \eta_V(\nabla \cdot \mathbf{v})^2 + \nabla \cdot \lambda \nabla T - \\ & -\nabla \cdot \sum_i \left(h_i + \frac{p}{\rho c_i} k_{Ti} \right) \mathbf{J}_i + \sum_i \mathbf{J}_i \mathbf{F}_i. \end{aligned} \quad (2.94)$$

Комментарии

1. Вектор плотности массового диффузионного потока \mathbf{J}_i определен выражением (2.77).

2. Уравнения газодинамики должны быть дополнены термическим и калорическим уравнениями состояния

$$p = p(\rho, c_i, T); \quad u = u(p, \rho, c_i). \quad (2.95)$$

3. Для смеси идеальных газов

$$p = \frac{\rho}{m} kT, \quad \frac{1}{m} = \sum_i \frac{c_i}{m_i}, \quad du = c_V(T, c_i) dT. \quad (2.96)$$

4. Для газа атомов и невозбужденных молекул c_V определяется соотношением (2.46).

Список литературы к главе 2

1. де Гроот С., Мазур П. Неравновесная термодинамика. — М.: Мир, 1964. — 456 с.
2. Гирифельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей. — М.: Изд-во иностр. лит., 1961. — 930 с.
3. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Гидродинамика. — М.: Наука, 1986. — 736 с.

4. *Пилюгин Н.Н., Тирский Г.А.* Динамика ионизованного излучающего газа. — М.: Изд-во МГУ, 1989. — 312 с.
5. *Жданов В.М., Тирский Г.А.* Феноменологическое и кинетическое описание диффузии и переноса тепла в многокомпонентных газовых смесях // Прикл. матем. и мех. 2007. Т. 71, вып. 2. С. 794–815.
6. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Статистическая физика. Ч. 1. — М.: Наука, 1976. — 584 с.
7. *Чепмен С., Каулинг Т.* Математическая теория неоднородных газов. — М.: Изд-во иностр. лит., 1960. — 511 с.
8. *Ферцигер Дж., Капер Г.* Математическая теория процессов переноса в газах. — М.: Мир, 1976. — 556 с.
9. *Жданов В.М., Ролдугин В.И.* О кинетическом обосновании обобщенной неравновесной термодинамики многокомпонентных систем // ЖЭТФ. 2002. Т. 122, вып. 4(10). С. 789–804.
10. *Колесников А.Ф., Тирский Г.А.* Уравнения гидродинамики для частично ионизованных многокомпонентных смесей газов с коэффициентами переноса в высших приближениях // Молекулярная газодинамика. — М.: Наука, 1982. — С. 20–44.
11. *Франк-Каменецкий Д.А.* Диффузия и теплопередача в химической кинетике. — М.: Наука, 1967. — 482 с.
12. *Жданов В.М., Тирский Г.А.* Применение метода моментов к выводу уравнений переноса газа и плазмы с коэффициентами переноса в высших приближениях // Прикл. матем. и мех. 2003. Т. 67, вып. 3. С. 406–433.

Глава 3

УРАВНЕНИЯ ПЕРЕНОСА В КИНЕТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ГАЗОВ

В данной главе приводятся кинетические уравнения Больцмана для пространственно неоднородных смесей атомарных газов и смесей молекулярных газов при возбуждении внутренних степеней свободы [1–6]. Решением систем кинетических уравнений Больцмана являются функции распределения частиц, составляющих смесь, по скоростям и энергиям возбуждения. Приведены различные формы записи конвективной части кинетического уравнения Больцмана и операторов (интегралов) упругих и неупругих столкновений. Средние значения молекулярных признаков (свойств) частиц определены как интегралы от функций распределения. Дана формулировка уравнений переноса молекулярных признаков (свойств) частиц. Записаны выражения для аддитивных инвариантов столкновений и уравнения сохранения массы, импульса и энергии частиц.

3.1. Смесь атомарных газов

Назначение модели

Формулировка уравнений переноса для пространственно неоднородных смесей идеальных газов.

Допущения

1. Частицы смеси предполагаются бесструктурными и трактуются как точечные центры сил, их поступательное движение рассматривается в рамках классической механики.

2. Учитываются парные упругие взаимодействия (столкновения) частиц; столкновения частиц происходят мгновенно и в одной точке.

Ограничения

1. Рассматривается идеальный газ: тройными столкновениями частиц пренебрегается: $nR_0^3 \ll 1$, где n — концентрация частиц, R_0 — газокинетический радиус упругого столкновения.

2. Справедлива гипотеза молекулярного хаоса, предполагающая отсутствие корреляции между состояниями сталкивающихся частиц. Условие применимости молекулярного хаоса накладывает ограничения

на рассматриваемые интервалы времени Δt в зависимости от скоростей частиц: $\Delta t \gg R_0/c$ (см. также введение, [2]).

3.1.1. Система кинетических уравнений Больцмана

Система кинетических уравнений Больцмана в переменных \mathbf{c}_i

$$D_i(f_i) = J_i; \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (3.1)$$

Конвективная часть кинетического уравнения

$$D_i(f_i) = \frac{\partial f_i(\mathbf{c}_i, \mathbf{r}, t)}{\partial t} + \mathbf{c}_i \cdot \nabla f_i(\mathbf{c}_i, \mathbf{r}, t) + \mathbf{F}_i(\mathbf{r}, t) \cdot \nabla_{\mathbf{c}_i} f_i(\mathbf{c}_i, \mathbf{r}, t). \quad (3.2)$$

Оператор столкновений

$$J_i = \sum_j J_{ij} = \sum_j J(f_i, f_j). \quad (3.3)$$

Интегралы столкновений частицы компонента i с частицей компонента j

$$\begin{aligned} J_{ij} &= \int (f'_i f'_j - f_i f_j) g_{ij} b \, db \, d\varphi \, d\mathbf{c}_j = \\ &= \int (f'_i f'_j - f_i f_j) g_{ij} \sigma_{ij}(g_{ij}, \chi) \, d\Omega \, d\mathbf{c}_j, \\ f'_i &= f_i(\mathbf{c}'_i, \mathbf{r}, t); \quad f'_j = f_j(\mathbf{c}'_j, \mathbf{r}, t), \\ f_i &= f_i(\mathbf{c}_i, \mathbf{r}, t); \quad f_j = f_j(\mathbf{c}_j, \mathbf{r}, t), \\ g_{ij} &= |\mathbf{c}_i - \mathbf{c}_j|; \quad d\Omega = \sin \chi \, d\chi \, d\varphi. \end{aligned} \quad (3.4a)$$

Интеграл столкновений частиц компонента i

$$\begin{aligned} J_{ii} &= \int (f'_i f'_{i_1} - f_i f_{i_1}) g_{ii_1} b \, db \, d\varphi \, d\mathbf{c}_{i_1} = \\ &= \int (f'_i f'_{i_1} - f_i f_{i_1}) g_{ii_1} \sigma_{ii_1}(g_{ii_1}, \chi) \, d\Omega \, d\mathbf{c}_{i_1}, \end{aligned} \quad (3.4б)$$

где $f'_i = f_i(\mathbf{c}'_i, \mathbf{r}, t)$; $f'_{i_1} = f_{i_1}(\mathbf{c}'_{i_1}, \mathbf{r}, t)$; $g_{ii_1} = |\mathbf{c}_i - \mathbf{c}_{i_1}|$.

Для однокомпонентного газа индексы i, j опускаются. Кинетическое уравнение Больцмана для функции распределения $f(\mathbf{c}, \mathbf{r}, t)$ принимает вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{c} \cdot \nabla f + \mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{c}} f = \int (f' f'_1 - f f_1) g b \, db \, d\varphi \, d\mathbf{c}_1. \quad (3.4в)$$

Комментарии

1. Оператор столкновений (3.3) представляет собой сумму интегралов столкновений $J_{ij} \equiv J(f_i, f_j)$ и является функционалом от $\mathbf{c}_i, \mathbf{r}, t$.

2. Для получения выражения (3.4б) в формулах (3.4а) переменная интегрирования \mathbf{c}_j заменяется на \mathbf{c}_{i_1} .

3. Потенциалы взаимодействия частиц предполагаются заданными. Скорости после столкновения $\mathbf{c}'_i, \mathbf{c}'_j$ выражаются через $\mathbf{c}_i, \mathbf{c}_j, b, \varphi$ (или χ, φ). Модели потенциалов взаимодействия (и сечений рассеяния) см. введение, [1], разд. 1.

Система кинетических уравнений в переменных $\mathbf{C}_i = \mathbf{c}_i - \mathbf{v}, \mathbf{r}, t$

Конвективная часть уравнения (3.3)

$$\begin{aligned} \frac{d f_i(\mathbf{C}_i, \mathbf{r}, t)}{dt} + \mathbf{C}_i \cdot \nabla f_i(\mathbf{C}_i, \mathbf{r}, t) + \left[\mathbf{F}_i(\mathbf{r}, t) - \frac{d \mathbf{v}(\mathbf{r}, t)}{dt} \right] \times \\ \times \nabla_C f_i(\mathbf{C}_i, \mathbf{r}, t) - [\nabla_C f_i(\mathbf{C}_i, \mathbf{r}, t)] \mathbf{C}_i : \nabla \mathbf{v}(\mathbf{r}, t), \quad (3.5) \\ \frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) \cdot \nabla. \end{aligned}$$

Оператор столкновений определяется выражениями (3.3), (3.4) при замене $\mathbf{c}'_i, \mathbf{c}'_j, \mathbf{c}_i, \mathbf{c}_j$ на $\mathbf{C}'_i, \mathbf{C}'_j, \mathbf{C}_i, \mathbf{C}_j$.

Комментарий

Запись кинетических уравнений и уравнений переноса через собственные скорости частиц применяется в методах Чепмена–Энскога и Грэда [6, 7].

3.1.2. Уравнения переноса молекулярных признаков (свойств) частиц компонента i

Уравнения переноса молекулярных признаков (свойств) $\phi_i(\mathbf{c}_i, \mathbf{r}, t)$

$$\gamma_i[\phi_i] = \int \phi_i(\mathbf{c}_i, \mathbf{r}, t) J_i d\mathbf{c}_i. \quad (3.6)$$

Конвективная часть уравнения (3.6)

$$\gamma_i[\phi_i] = \frac{\partial(n_i \bar{\phi}_i)}{\partial t} + \nabla \cdot n_i \mathbf{c}_i \bar{\phi}_i - n_i \left\{ \frac{\partial(\bar{\phi}_i)}{\partial t} + \mathbf{c}_i \nabla \cdot \bar{\phi}_i + \mathbf{F}_i \cdot \nabla_{\mathbf{c}} \bar{\phi}_i \right\}. \quad (3.7)$$

Интегральная часть уравнения

$$\begin{aligned} \int \phi_i(\mathbf{c}_i, \mathbf{r}, t) J_i d\mathbf{c}_i = \\ = \sum_j \int [\phi_i(\mathbf{c}'_i, \mathbf{r}, t) - \phi_i(\mathbf{c}_i, \mathbf{r}, t)] f_i f_j g_{ij} \sigma_{ij} d\Omega d\mathbf{c}_j d\mathbf{c}_i = \\ = \frac{1}{2} \sum_j (\phi_i(\mathbf{c}_i, \mathbf{r}, t) - \phi_i(\mathbf{c}'_i, \mathbf{r}, t)) (f'_i f'_j - f_i f_j) g_{ij} \sigma_{ij} d\Omega d\mathbf{c}_j d\mathbf{c}_i. \quad (3.8) \end{aligned}$$

Уравнения переноса молекулярного признака (свойства) $\phi_i(\mathbf{C}_i, \mathbf{r}, t)$

$$\Gamma_i[\phi_i] = \int \phi_i(\mathbf{C}_i, \mathbf{r}, t) J_i d\mathbf{C}_i. \quad (3.9)$$

Конвективная часть уравнения

$$\begin{aligned} \Gamma_i[\phi_i] = & \frac{d(n_i \langle \phi_i \rangle)}{dt} + \nabla \cdot n_i \langle \mathbf{C}_i \phi_i \rangle - n_i \left\{ \frac{d \langle \phi_i \rangle}{dt} + \langle \mathbf{C}_i \cdot \nabla \phi_i \rangle + \right. \\ & \left. + \left(\mathbf{F}_i - \frac{d\mathbf{v}}{dt} \right) \cdot \langle \nabla_C \phi_i \rangle \right\} - n_i (\langle \mathbf{C}_i \nabla_C \phi_i \rangle + \langle \phi_i \nabla_C \mathbf{C}_i \rangle) : \nabla \mathbf{v}. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Суммарные уравнения переноса молекулярных признаков $\phi_i(\mathbf{c}_i, \mathbf{r}, t)$

$$\sum_i \gamma_i[\phi_i] = \sum_i \int \phi_i(\mathbf{c}_i, \mathbf{r}, t) J_i d\mathbf{c}_i = \frac{1}{4} \sum_{i,j} \int \delta\phi(f'_i f'_j - f_i f_j) \times \\ \times g_{ij} \sigma_{ij} d\Omega d\mathbf{c}_j d\mathbf{c}_i, \quad (3.11)$$

$$\delta\phi = \phi_i(\mathbf{c}_i, \mathbf{r}, t) + \phi_j(\mathbf{c}_j, \mathbf{r}, t) - \phi_i(\mathbf{c}'_i, \mathbf{r}, t) - \phi_j(\mathbf{c}'_j, \mathbf{r}, t). \quad (3.12)$$

Суммарные уравнения переноса молекулярных признаков $\phi_i(\mathbf{C}_i, \mathbf{r}, t)$

$$\sum_i \Gamma_i[\phi_i] = \sum_i \int \phi_i(\mathbf{C}_i, \mathbf{r}, t) J_i d\mathbf{C}_i. \quad (3.13)$$

Комментарий

Интегральные части уравнений (3.9) и (3.13) получаются из (3.8), (3.11) заменой $\mathbf{c}_i, \mathbf{c}_j, \mathbf{c}'_i, \mathbf{c}'_j$ на собственные скорости $\mathbf{C}_i, \mathbf{C}_j, \mathbf{C}'_i, \mathbf{C}'_j$.

3.1.3. Аддитивные инварианты столкновений. Уравнения сохранения

Аддитивные инварианты столкновений

$$\phi_i^{(1)} = m_i, \quad \phi_i^{(2)} = m_i \mathbf{c}_i, \quad \phi_i^{(3)} = \frac{m_i \mathbf{c}_i^2}{2} \quad (3.14)$$

определяются на основании законов сохранения массы, импульса и энергии при упругих столкновениях частиц. При $\phi_i = \phi_i^{(n)}$, $n = 1, 2, 3$ интегральные члены уравнений переноса обращаются в нуль. При $\phi_i = \phi_i^{(1)}$ в нуль обращается выражение (3.8), так как величина $\phi_i^{(1)} = m_i$ при столкновении не меняется; при $\phi_i = \phi_i^{(2)}$ в нуль обращается правая часть уравнения (3.11) с учетом (3.12), так как $\delta\phi^{(n)} = 0$. В результате получается система уравнений сохранения: уравнения неразрывности, движения и энергии соответственно:

$$\frac{d\rho_i}{dt} + \rho_i \nabla \cdot \mathbf{v} + \nabla \cdot \rho_i \mathbf{V}_i = 0, \quad (3.15a)$$

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} + \nabla \cdot \mathbf{\Pi} - \sum_i \rho_i \mathbf{F}_i = 0, \quad (3.15б)$$

$$\rho \frac{d}{dt} \left(\frac{3p}{2\rho} \right) + \mathbf{\Pi} : \nabla \mathbf{v} + \nabla \cdot \mathbf{q} - \sum_i \rho_i \mathbf{V}_i \cdot \mathbf{F}_i = 0. \quad (3.15в)$$

Комментарий

В кинетической теории вместо уравнения (3.15а) для плотности массы ρ_i обычно используется уравнение для плотности числа частиц (концентрации n_i), имеющее аналогичный вид.

3.2. Смеси молекулярных газов при учете внутренних степеней свободы молекул и химических реакций

Назначение модели

Формулировка уравнений переноса для пространственно неоднородных смесей молекулярных газов, в том числе при наличии химических реакций.

Допущения

1. Частицы смеси (молекулы, атомы) обладают внутренними степенями свободы.
2. Среда трактуется как смесь газов, различающихся не только химическим составом, но и квантованными значениями внутренней энергии частиц.
3. Поступательное движение частиц рассматривается в рамках классической механики.
4. Обмен поступательной и внутренней энергией, возбуждение химических реакций происходит при столкновениях.
5. Столкновения осуществляются мгновенно и в одной точке.
6. Законы взаимодействия молекул усредняются по ориентациям их моментов импульса.
7. Время жизни промежуточных комплексов частиц, возникающих при протекании химических реакций, пренебрежимо мало.

Ограничения

Условия применимости для кинетического уравнения Больцмана см. [8].

3.2.1. Система кинетических уравнений

Система кинетических уравнений

$$D_{i\alpha}(f_{i\alpha}) = J_{i\alpha}; \quad i = 1, 2, \dots, N; \quad \alpha = 1, 2, \dots, N^{(i)}. \quad (3.16)$$

Индекс α характеризует квантовое состояние частицы: $\alpha = \alpha_R \alpha_{V_1} \alpha_{V_2} \dots$, где α_R относятся к вращениям, α_{V_1} — к первой колебательной моде и т.д.

Конвективная часть уравнения (3.16)

$$D_{i\alpha}(f_{i\alpha}) = \frac{\partial f_{i\alpha}(\mathbf{c}_i, E_{i\alpha}, \mathbf{r}, t)}{\partial t} + \mathbf{c}_i \cdot \nabla f_{i\alpha}(\mathbf{c}_i, E_{i\alpha}, \mathbf{r}, t) + \mathbf{F}(\mathbf{r}, t)_i \cdot \nabla_{\mathbf{c}} f_{i\alpha}(\mathbf{c}_i, E_{i\alpha}, \mathbf{r}, t).$$

Определения

$f_{i\alpha}(\mathbf{c}_i, E_{i\alpha}, \mathbf{r}, t)$ — функция распределения частиц сорта $i\alpha$ по скоростям и энергиям

$dn_{i\alpha} = f_{i\alpha}(\mathbf{c}_i, E_{i\alpha}, \mathbf{r}, t) d\mathbf{r} d\mathbf{c}_i$ — среднее число частиц (математическое ожидание числа частиц) химического компонента i , обладающих энергией $E_{i\alpha}$, в элементе фазового пространства $d\mathbf{r} d\mathbf{c}_i$

Функция распределения $f_{i\alpha}(\mathbf{c}_i, E_{i\alpha}, \mathbf{r}, t)$ нормирована на заселенность (число частиц компонента i в квантовом состоянии α) в единице объема:

$$n_{i\alpha}(\mathbf{r}, t) = \int f_{i\alpha}(\mathbf{c}_i, E_{i\alpha}, \mathbf{r}, t) d\mathbf{c}_i. \quad (3.17)$$

Комментарий

Запись кинетического уравнения через собственные скорости частиц производится аналогично записи (3.5). В операторе столкновений абсолютные скорости частиц ($\mathbf{c}_i, \mathbf{c}_j$ и т. д.) заменяются на собственные скорости частиц ($\mathbf{C}_i, \mathbf{C}_j$ и т. д.).

Операторы столкновений

Оператор столкновений

$$J_{i\alpha} \equiv J_{i\alpha}^{\text{el}} + J_{i\alpha}^{\text{in}} + J_{i\alpha}^{\text{ch}} + J_{i\alpha}^{\text{di}}.$$

Оператор $J_{i\alpha}^{\text{el}}$ описывает упругие столкновения:

$$J_{i\alpha}^{\text{el}} = \sum_{j\beta} \int (f'_{i\alpha} f'_{j\beta} - f_{i\alpha} f_{j\beta}) g_{ij} \sigma_{i\alpha j\beta}^{i\alpha j\beta}(g_{ij}, \chi) d\Omega d\mathbf{c}_j, \quad (3.18)$$

где $f'_{i\gamma} = f_{i\gamma}(\mathbf{c}'_i, E_{i\gamma}, \mathbf{r}, t)$; $f'_{j\delta} = f_{j\delta}(\mathbf{c}'_j, E_{j\delta}, \mathbf{r}, t)$.

Оператор $J_{i\alpha}^{\text{in}}$ описывает неупругие столкновения с обменом поступательной, вращательной, колебательной и электронной энергий частиц:

$$J_{i\alpha}^{\text{in}} = \sum_{j\beta \gamma \delta} \int \left(\frac{S_{i\alpha} S_{j\beta}}{S_{i\gamma} S_{j\delta}} f'_{i\gamma} f'_{j\delta} - f_{i\alpha} f_{j\beta} \right) g_{ij} \sigma_{i\alpha j\beta}^{i\gamma j\delta}(g_{ij}, \chi) d\Omega d\mathbf{c}_j, \quad (3.19)$$

$$f'_{i\gamma} = f_{i\gamma}(\mathbf{c}'_i, E_{i\gamma}, \mathbf{r}, t); \quad f'_{j\delta} = f_{j\delta}(\mathbf{c}'_j, E_{j\delta}, \mathbf{r}, t).$$

Оператор $J_{i\alpha}^{\text{ch}}$ описывает столкновения, приводящие к бимолекулярным химическим реакциям:

$$J_{i\alpha}^{\text{ch}} = \sum_{j\beta k\gamma l\delta} \int \left[\frac{S_{i\alpha} S_{j\beta}}{S_{k\gamma} S_{l\delta}} \left(\frac{m_i m_j}{m_k m_l} \right)^3 f'_{k\gamma} f'_{l\delta} - f_{i\alpha} f_{j\beta} \right] \times \\ \times g_{ij} \sigma_{i\alpha j\beta}^{k\gamma l\delta}(g_{ij}, \chi) d\Omega d\mathbf{c}_j, \quad (3.19a)$$

$$f'_{k\gamma} = f_{k\gamma}(\mathbf{c}'_k, E_{k\gamma}, \mathbf{r}, t); \quad f'_{l\delta} = f_{l\delta}(\mathbf{c}'_l, E_{l\delta}, \mathbf{r}, t).$$

Оператор столкновений $J_{i\alpha}^{\text{di}}$ описывает процессы с бинарными и тройными столкновениями.

Пример 1

Однокомпонентный молекулярный газ

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_\alpha(\mathbf{c}, E_\alpha, \mathbf{r}, t)}{\partial t} + \mathbf{c} \cdot \nabla f_\alpha(\mathbf{c}, E_\alpha, \mathbf{r}, t) + \\ + \mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{c}} f_\alpha(\mathbf{c}, E_\alpha, \mathbf{r}, t) = J_\alpha^{\text{el}} + J_\alpha^{\text{in}}. \end{aligned} \quad (3.20)$$

Пример 2

Смесь нереагирующих молекулярных газов

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_{i\alpha}(\mathbf{c}_i, E_{i\alpha}, \mathbf{r}, t)}{\partial t} + \mathbf{c}_i \cdot \nabla f_{i\alpha}(\mathbf{c}_i, E_{i\alpha}, \mathbf{r}, t) + \\ + \mathbf{F}_i \cdot \nabla_{\mathbf{c}} f_{i\alpha}(\mathbf{c}_i, E_{i\alpha}, \mathbf{r}, t) = J_{i\alpha}^{\text{el}} + J_{i\alpha}^{\text{in}}. \end{aligned} \quad (3.21)$$

3.2.2. Уравнения переноса

Уравнения переноса молекулярного признака (свойства) $\phi_{i\alpha}(\mathbf{c}_i, E_{i\alpha}, \mathbf{r}, t)$

$$\gamma_{i\alpha}[\phi_{i\alpha}] = \int \phi_{i\alpha}(\mathbf{c}_i, E_{i\alpha}, \mathbf{r}, t) J_{i\alpha} d\mathbf{c}_i. \quad (3.22)$$

Конвективная часть уравнения

$$\begin{aligned} \gamma_{i\alpha}[\phi_{i\alpha}] = \frac{\partial}{\partial t} (n_{i\alpha} \overline{\phi_{i\alpha}}) + \nabla \cdot n_{i\alpha} \overline{\mathbf{c}_i \phi_{i\alpha}} - \\ - n_{i\alpha} \left\{ \frac{\partial}{\partial t} (\overline{\phi_{i\alpha}}) + \overline{\mathbf{c}_i \cdot \nabla \phi_{i\alpha}} + \mathbf{F}_i(\mathbf{r}, t) \cdot \overline{\nabla_{\mathbf{c}} \phi_{i\alpha}} \right\}. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Суммарные уравнения переноса для $\phi_{i\alpha}(\mathbf{c}_i, E_{i\alpha}, \mathbf{r}, t)$

$$\sum_{i\alpha} \gamma_{i\alpha}[\phi_{i\alpha}] = \sum_{i\alpha} \int \phi_{i\alpha}(\mathbf{c}_i, E_{i\alpha}, \mathbf{r}, t) J_{i\alpha} d\mathbf{c}_i. \quad (3.24)$$

Комментарии

1. Уравнения переноса в переменных $\mathbf{C}_i = \mathbf{c}_i - \mathbf{v}, \mathbf{r}, t$ получаются аналогично (3.9), (3.10).

2. Система уравнений баланса заселенностей ($\phi_{i\alpha} = 1$) имеет вид

$$\frac{dn_{i\alpha}}{dt} + n_{i\alpha} \nabla \cdot \mathbf{v} + \nabla \cdot n_{i\alpha} \mathbf{v}_{i\alpha} = K_{i\alpha}; \quad K_{i\alpha} \equiv \int J_{i\alpha} d\mathbf{c}_i, \quad (3.25)$$

(см. уравнение (8.4), где приведены уравнения переноса, а также уравнения движения и уравнение переноса энергии).

Определения

Среднее значение молекулярного признака (свойства) $\phi_{i\alpha}(\mathbf{c}_i, E_{i\alpha}, r, t)$

$$\bar{\phi}_{i\alpha} = \frac{1}{n_{i\alpha}} \int \phi_{i\alpha}(\mathbf{c}_i, E_{i\alpha}, r, t) f_{i\alpha}(\mathbf{c}_i, E_{i\alpha}, r, t) d\mathbf{c}_i. \quad (3.26)$$

Среднее значение молекулярного признака (свойства) $\phi_{i\alpha}(\mathbf{C}_i, E_{i\alpha}, r, t)$ (в собственных скоростях)

$$\langle \phi_{i\alpha} \rangle = \frac{1}{n_{i\alpha}} \int \phi_{i\alpha}(\mathbf{C}_i, E_{i\alpha}, r, t) f_{i\alpha}(\mathbf{C}_i, E_{i\alpha}, r, t) d\mathbf{C}_i. \quad (3.27)$$

Внутренняя энергия, отнесенная к числу частиц

$$\varepsilon = \frac{1}{n} \sum_{i\alpha} n_{i\alpha} \left\langle \frac{m_i \mathbf{C}_i^2}{2} + E_{i\alpha} + E_i^{\text{ch}} \right\rangle.$$

Вектор плотности теплового потока, обусловленный поступательной энергией молекул

$$\mathbf{q}_t = \sum_{i\alpha} n_{i\alpha} \frac{m_i}{2} \langle \mathbf{C}_i \mathbf{C}_i^2 \rangle.$$

Вектор плотности теплового потока, обусловленный внутренней энергией молекул и энергией E_i^{ch} образования частиц компонента i при наличии химических реакций

$$\mathbf{q}_v = \sum_{i\alpha} n_{i\alpha} (E_{i\alpha} + E_i^{\text{ch}}) \mathbf{V}_{i\alpha}.$$

Определения других параметров см. введение.

3.2.3. Аддитивные инварианты столкновений и уравнения сохранения

Аналогично уравнениям (3.11), (3.12) подынтегральное выражение в правой части уравнения (3.24) содержит величину $\delta\phi$ — разность значений молекулярных признаков (свойств) частиц до и после столкновения. При парных столкновениях

$$\delta\phi = \phi_{i\alpha} + \phi_{j\beta} - \phi'_{k\gamma} - \phi'_{l\delta}$$

(см. разд. 3.1.3), при переходе $2 \rightarrow 3$ (диссоциация)

$$\delta\phi = \phi_{i\alpha} + \phi_{j\beta} - \phi'_{k\gamma} - \phi'_{l\delta} - \phi'_{m\lambda}.$$

Величина $\delta\phi$ и правые части уравнений (3.25) обращаются в нуль на аддитивных инвариантах столкновений. В общем случае таковыми являются: масса, число атомов, импульс и энергия сталкивающихся частиц. Следствием являются уравнения гл. 1: неразрывности (1.5), сохранения массы химических элементов (1.14), движения (1.18) и энергии (1.21).

Комментарии

1. Оператор столкновений $J_{i\alpha}$ является функционалом от $\mathbf{c}_i, E_{i\alpha}, \mathbf{r}, t$.

2. Когда при суммировании в уравнениях (3.21)–(3.23) индекс j становится равным i , то \mathbf{c}_j заменяется на \mathbf{c}_{i1} (сталкиваются молекулы одного сорта со скоростями \mathbf{c}_i и \mathbf{c}_{i1}).

3. Для молекулярного газа наиболее общим кинетическим уравнением является уравнение Вальдмана–Снайдера [5, 8, 9], с квантовым описанием внутреннего движения молекул. На его основе проводились исследования поведения газа из молекул-ротаторов в магнитном поле [8]. Также применялось уравнение Кагана–Максимова [3, 8, 9], описывающее вращение молекул в рамках классической механики.

4. Усреднение по ориентациям момента импульса молекулы приводит к уравнению Вальдмана; при этом сечения столкновений молекул зависят только от их относительной скорости и угла рассеяния (точечные молекулы). Такое осреднение возможно в отсутствие магнитного поля для газа молекул, близких к сферически симметричным (N_2 , O_2 , CO_2 и т. д.).

5. Кинетическое уравнение (3.21) есть уравнение Ван Чан–Уленбека–де Бура [4, 10], оно справедливо, если пренебрегается вырождением ($S = 1$) (квазиклассическая модель). Учет вырождения вращательных состояний молекул был проведен Вальдманом в сферически симметричном приближении, в котором сечение столкновения не зависит от азимутального угла φ .

6. Оператор $J_{i\alpha}^{\text{di}}$ описывает парные и тройные столкновения, приводящие к диссоциации, рекомбинации, ионизации. Приближенная модель для диссоциации и рекомбинации предложена Людвигом и Хейлем [11].

7. Учет бимолекулярных химических реакций проводится обобщением оператора (3.19). Первоначальная приближенная кинетическая модель [11] обосновывается в [12–14]. Кинетическая теория реагирующих газов с учетом возбуждения вращений и колебаний молекул, бинарных и тройных столкновений частиц дана в [15].

8. Оператор (3.19a) является формальной моделью вкладов в кинетическое уравнение бимолекулярных химических реакций. При учете реакций диссоциации и рекомбинации теория усложняется необходимостью учета тройных столкновений. Предполагается, что все столкновения, включая тройные, являются точечными и мгновенными, диссоциировать может только одна из сталкивающихся двухатомных молекул, при этом вторая играет роль партнера и не меняет своего энергетического состояния в результате столкновения. В таком виде оператор $J_{i\alpha}^{\text{di}}$ получен в [12, 14, 15].

9. Другие формы записи операторов столкновений для реагирующих газов и газов, в которых происходит изменение состояний, описывающих внутренние степени свободы, приведены в [16].

Список литературы к главе 3

1. Чепмен С., Каулинг Т. Математическая теория неоднородных газов. — М.: Изд-во иностр. лит., 1960. — 510 с.
2. Черчиньяни К. Теория и приложения уравнения Больцмана. — М.: Мир, 1978. — 495 с.
3. Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Физическая кинетика. — М.: Наука, 1979. — 527 с.
4. Ферцигер Дж., Капер Г. Математическая теория процессов переноса в газах. — М.: Мир, 1976. — 554 с.
5. Вальдман Л. Явления переноса в газах при среднем давлении // Термодинамика газов. — М.: Машиностроение, 1970. — С. 169–414.
6. Гиршфельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей. — М.: Изд-во иностр. лит., 1961. — 930 с.
7. Коган М. Н. Динамика разреженного газа. — М.: Наука, 1967. — 440 с.
8. McCourt F. R. W., Beenakker J. J. M., Kohler W. E. *et al.* Nonequilibrium Phenomena in Polyatomic Gases. V. 1, 2. — Oxford: Clarendon Press, 1990. — 879 p.
9. Жданов В. М., Алиевский М. Я. Процессы переноса и релаксации в молекулярных газах. — М.: Наука, 1989. — 332 с.
10. Валландер С. В., Нагнибеда Е. А., Рыдалевская М. А. Некоторые вопросы кинетической теории химически реагирующей смеси газов. — Л.: Изд-во ЛГУ, 1977. — 280 с.
11. Ludwig G., Heil M. Boundary layer theory with dissociation and ionization // Advances in Applied Mechanics. V. VI. — New York: Academic Press, 1960 (рус. пер.: Людвиг Г., Хейль М. Теория пограничного слоя в газах и жидкостях с диссоциацией и ионизацией // Проблемы механики: Пер. с англ./Под ред. Х. Грайден, Т. Карман. — М.: Изд-во иностр. лит., 1963. — Вып. 4. — С. 39–99).
12. Kušner I. Dissociation and recombination in an inhomogeneous gas // Physica A. 1991. V. 176. P. 542–556.
13. Kustova E. V., Nagnibeda E. A., Chauvin A. State-to-state nonequilibrium reaction rates // Chem. Phys. 1999. V. 248, № 2–3. P. 221–232.
14. Рыдалевская М. А. Формальное кинетическое описание смесей газов с диссоциацией и рекомбинацией // Аэродинамика разреженных газов. — Вып. 9. — Л.: Изд-во ЛГУ, 1978. — С. 5–20.
15. Рыдалевская М. А. Статистические и кинетические модели в физико-химической газодинамике. — СПб.: Изд-во СПбГУ, 2003. — 248 с.
16. Giovangigli V. Multicomponent Flow Modeling. — Boston–Basel–Berlin: Birkhauser, 1999. — 321 p.

Глава 4

СООТНОШЕНИЯ ПЕРЕНОСА В ГАЗАХ ПРИ СЛАБОМ ОТКЛОНЕНИИ ОТ ЛОКАЛЬНОГО РАВНОВЕСИЯ (МЕТОДЫ ЧЕПМЕНА–ЭНСКОГА И ГРЭДА)

В гл. 1 и 2 при помощи термодинамики необратимых процессов получены уравнения газодинамики, в частности выражения, описывающие явления переноса. Входящие в эти выражения коэффициенты переноса определяются экспериментально. Однако для заданной смеси газов они являются сложными функциями многих переменных: температуры и плотности смеси и концентраций химических компонентов. При небольших значениях температуры T достаточно хорошо разработаны методики измерения сдвиговой вязкости и теплопроводности. Известные трудности возникают при измерениях коэффициентов диффузии и термодиффузии. При больших температурах прямые измерения коэффициентов переноса невозможны.

С помощью методов кинетической теории газов можно найти выражения для коэффициентов переноса с явной зависимостью от плотности и концентраций химических компонентов, что кардинально сокращает необходимый объем экспериментальных исследований. Зависимости от температуры известны, если известны интегральные сечения столкновений частиц. В результате вместо прямых измерений коэффициентов переноса необходимы методики экспериментального определения этих сечений, в случае одноатомных газов — исследования межмолекулярных потенциалов. При больших температурах такие измерения проводятся, например, при помощи молекулярных пучков. Интенсивно разрабатываются теоретико-расчетные исследования взаимодействия частиц.

Как и в гл. 1 и 2, состояние газовой среды предполагается близким к локальному равновесию по поступательным и внутренним степеням свободы частиц. Движение среды описывается среднemasсовой скоростью \mathbf{v} и средней температурой смеси T . Соответствующие условия широко встречаются на практике.

Для смеси нейтральных или слабоионизованных газов наибольшее применение нашел метод Чепмена–Энскога [1–12]. В п. 4.1.1 рассмат-

ривается смесь атомарных газов. Этот случай занимает центральное место в кинетической теории переносных свойств, так как полученные здесь результаты используются и при проведении практических расчетов для смесей многоатомных реагирующих газов (влиянием внутренних степеней свободы частиц вообще пренебрегается либо вводятся некоторые поправки (см. гл. 10)). Далее рассматриваются смеси многоатомных нереагирующих (п. 4.1.2) и многоатомных реагирующих газов (разд. 4.1.3). Полученные здесь результаты для коэффициентов переноса носят формальный характер, так как в настоящее время сведения о сечениях неупругих столкновений недостаточно полны.

Метод Грэда, кратко изложенный, например в [6], наибольшее применение получил для плазмы (гл. 11 и 12). В разд. 4.2 его основные особенности иллюстрируются на более простом примере смеси молекулярных нейтральных газов.

Обозначения

$f^{(0)}$ — нулевое (по числу Кн) приближение к функции распределения (первый член разложения f в ряд по степеням числа Кнудсена)

$f^{(0)} + f^{(1)}$ — первое по числу Кн приближение к функции распределения

$f^{(1)}$ — второй член разложения функции распределения в ряд по степеням числа Кнудсена (поправка к $f^{(0)}$)

φ — отношение второго члена разложения к первому ($\varphi = f^{(1)}/f^{(0)}$)

$I(\varphi)$ — линеаризованный относительно $f^{(0)}$ оператор столкновений.

4.1. Метод Чепмена–Энскога

Назначение метода

Вывод системы уравнений газовой динамики и получение выражений для переносных свойств и коэффициентов переноса, замыкающих эту систему, применительно к состояниям, близким к локальному термодинамическому равновесию.

4.1.1. Смесь атомарных газов

Допущения и ограничения указаны в разд. 3.1.

Система кинетических уравнений Больцмана в безразмерной форме

$$D_i^* f_i^* = \frac{1}{Kn} J_i^*; \quad i = 1, 2, \dots, N; \quad J_i^* = \sum_j J^*(f_i, f_j). \quad (4.1)$$

Функция распределения в безразмерной форме

$$f_i^* = f_i^*(\mathbf{c}_i^*, \mathbf{r}^*, t^*).$$

Число Кнудсена

$$Kn = \frac{l_0}{l_*} \quad \text{или} \quad Kn = \frac{\tau_0}{t_*}.$$

Разложения Чепмена–Энскога:

Функция распределения

$$f = \sum_{m=0}^{\infty} f^{(m)}; \quad f^{(m)} \sim \text{Kn}^m; \quad \text{Kn} \ll 1,$$

Оператор $\partial/\partial t$ или d/dt

$$\frac{\partial}{\partial t} = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\partial_m}{\partial t}; \quad \frac{\partial_m}{\partial t} \sim \text{Kn}^m \quad \text{или} \quad \frac{d_m}{dt} \sim \text{Kn}^m,$$

Выражения для переносных свойств

$$\mathbf{V}_i = \sum_{m=0}^{\infty} \mathbf{V}_i^{(m)}; \quad \mathbf{\Pi} = \sum_{m=0}^{\infty} \mathbf{\Pi}^{(m)}; \quad \boldsymbol{\pi} = \sum_{m=0}^{\infty} \boldsymbol{\pi}^{(m)}; \quad \mathbf{q} = \sum_{m=0}^{\infty} \mathbf{q}^{(m)},$$

Оператор столкновений

$$J_i = J_i^{(0)} + J_i^{(1)} + \dots; \quad J_i^{(0)} = \sum_j J(f_i^{(0)}, f_j^{(0)}),$$

$$J_i^{(1)} = \sum_j J(f_i^{(0)} f_j^{(1)} + f_i^{(1)} f_j^{(0)}).$$

Комментарии

1. Уравнения Больцмана в безразмерной форме рассмотрены в [6, 9]. Детальный анализ предположений при записи кинетических уравнений в форме (4.1) дан в [12]. Предполагается, что собственные скорости частиц порядка средней тепловой скорости. Массы m_i частиц и концентрации частиц компонента i n_i соизмеримы: при большом различии масс частиц в операторе J_i^* появляются слагаемые порядка единицы и порядка Kn , следствием чего является, например, двухтемпературная газодинамика [13–16]. Внешняя сила $m_i \mathbf{F}_i(\mathbf{r}, t)$ слабо меняется на длинах порядка l_0 .

2. При $\text{Kn} \ll 1$ выражение (4.1) есть система сингулярно возмущенных уравнений [3]. Разложение решения по Kn является внешним в физическом пространстве (вне кинетических слоев толщиной порядка l_0) и внутренним в пространстве скоростей.

3. Разложения в ряды по малому параметру не только искомых функций, но и оператора $\partial/\partial t$ применяются в весьма общем и эффективном методе теории возмущений — методе сокращения информации [17].

Система уравнений Больцмана в нулевом приближении

Система уравнений

$$J_i^{(0)} \equiv \sum_j J(f_i^{(0)}, f_j^{(0)}) = 0. \quad (4.2)$$

Решение системы уравнений

Решением системы уравнений (4.2) являются локально максвелловские функции распределения в нулевом приближении:

$$f_i^{(0)} = n_i(\mathbf{r}, t) \left[\frac{m_i}{2\pi kT(\mathbf{r}, t)} \right]^{3/2} \exp(-W_i^2); \quad W_i^2 = \frac{m_i C_i^2}{2kT(\mathbf{r}, t)}. \quad (4.3)$$

Следствие

$$\mathbf{V}_i^{(0)} = 0, \quad \Pi^{(0)} = p\delta, \quad \pi^{(0)} = 0, \quad \mathbf{q}^{(0)} = 0. \quad (4.4)$$

Подстановка равенств (4.4) в уравнения сохранения дает систему уравнений Эйлера:

$$\frac{dn_i}{dt} + n_i \nabla \cdot \mathbf{v} = 0; \quad \rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} + \nabla p = \sum_i \rho_i \mathbf{F}_i; \quad \frac{d}{dt} \left(\frac{\rho}{T^{3/2}} \right) = 0; \quad p = nkT.$$

Комментарий

В соответствии с выражением (4.3) и использованием алгоритма разложения по малому параметру все функции $f_i^{(m)}$, $m \geq 0$ зависят от собственных скоростей частиц \mathbf{C}_i . Поэтому используются также кинетические уравнения в форме (3.5), с применением разложения по числу Кнудсена Kn оператора d/dt вместо традиционного разложения оператора $\partial/\partial t$.

Газодинамические переменные: n_i , \mathbf{v} , T .

Определения

Концентрация частиц компонента i

$$n_i = \int f_i^{(0)} d\mathbf{c}_i.$$

Среднемассовая скорость

$$\mathbf{v} = \frac{1}{\rho} \sum_i \int m_i \mathbf{c}_i f_i^{(0)} d\mathbf{c}_i.$$

Температура

$$T = \frac{1}{3kn} \sum_i \int m_i C_i^2 f_i^{(0)} d\mathbf{C}_i.$$

На приближения высших порядков накладываются требования

$$\begin{aligned} \int f_i^{(m \geq 1)} d\mathbf{c}_i &= 0; \quad \sum_i \int m_i \mathbf{c}_i f_i^{(m \geq 1)} d\mathbf{c}_i = 0; \\ \sum_i \int m_i C_i^2 f_i^{(m \geq 1)} d\mathbf{C}_i &= 0. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Комментарий

Набор условий (4.5) определяется набором аддитивных инвариантов столкновений (гл. 3) и обеспечивает разрешимость интегральных уравнений метода Чепмена–Энскога.

В силу определений тензора давлений Π и температуры (см. п. 3.1.2), последнего условия (4.5) и равенства (4.4) для $\pi^{(0)}$ имеет место соотношение

$$\Pi = p\delta + \sum_{m=1}^{\infty} \pi^{(m)}, \quad p = nkT,$$

т.е. во всех приближениях по числу Кнудсена дивергентная часть тензора давлений равна $p\delta$ (так что $P = p$).

Система уравнений в первом приближении

Функция распределения в первом приближении имеет вид

$$f_i = f_i^{(0)} + f_i^{(1)}, \quad f_i^{(1)} \equiv f_i^{(0)} \varphi_i.$$

Система уравнений для нахождения поправок

$$L_i(\varphi) = D_i f_i^{(0)}$$

или

$$L_i(\varphi) = f_i^{(0)} \left\{ \frac{m_i}{kT} \left(\mathbf{C}_i \mathbf{C}_i - \frac{1}{2} \delta C_i^2 \right) : \nabla \mathbf{v} + \frac{n}{n_i} \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{d}_i + \right. \\ \left. + \left(W_i^2 - \frac{5}{2} \right) \mathbf{C}_i \cdot \nabla \ln T \right\}. \quad (4.6)$$

Определения

Линеаризованный оператор столкновений [2]

$$L_i(\varphi) \equiv - \sum_{j=1}^N n_i n_j I_{ij}(\varphi), \\ I_{ij}(\varphi) = \frac{1}{n_i n_j} \int f_i^{(0)} f_j^{(0)} (\varphi_i + \varphi_j - \varphi'_i - \varphi'_j) g_{ij} b db d\varphi d\mathbf{c}_j, \quad (4.7) \\ \varphi_i = \varphi_i(\mathbf{C}_i); \quad \varphi_j = \varphi_j(\mathbf{C}_j); \quad \varphi'_i = \varphi_i(\mathbf{C}'_i); \quad \varphi'_j = \varphi_j(\mathbf{C}'_j).$$

Диффузионная термодинамическая сила

$$\mathbf{d}_i = \nabla x_i + \left(x_i - \frac{\rho_i}{\rho} \right) \nabla \ln p - \frac{\rho_i}{p} \left(\mathbf{F}_i - \sum_j \frac{\rho_j}{\rho} \mathbf{F}_j \right); \quad x_i = \frac{n_i}{n}; \quad p = nkT.$$

Комментарии

1. Функции φ_i через газодинамические переменные зависят также от \mathbf{r}, t .

2. Нулевое приближение (4.3) определяет набор газодинамических переменных (n_i, \mathbf{v}, T) , для которых справедливы уравнения (3.15). При помощи функций распределения в первом приближении определяются переносные свойства, подстановка их в эти уравнения дает систему

уравнений Навье–Стокса. После вычисления функций φ_i коэффициенты переноса выражаются через параметры $x_i = n_i/n$, T и интегральные сечения упругих столкновений.

3. При вычислении правой части уравнения (4.6) использованы уравнения Эйлера:

$$\frac{d_0 n_i}{dt} = -n_i \nabla \cdot \mathbf{v}; \quad \frac{d_0 \mathbf{v}}{dt} = \frac{1}{\rho} \left(-\nabla p + \sum_i \rho_i \mathbf{F}_i \right); \quad \frac{d_0}{dt} \left(\frac{\rho}{T^{3/2}} \right) = 0.$$

4. Уравнения (4.6) образуют системы линейных неоднородных интегральных уравнений Фредгольма второго рода с самосопряженным интегральным оператором. Условия (4.5) делают решение этих систем единственным.

5. Учет следующих членов разложения Чепмена–Энскога приводит к уравнениям Барнетта ($m = 0, 1, 2$), уравнениям супербарнеттова приближения и т. д. [2, 6, 7]. Обзор этих уравнений и их решений дан в [12].

Решение системы уравнений

Решение системы уравнений (4.6) имеет вид

$$\varphi_i = \varphi_i^{(I)} + \varphi_i^{(II)}, \quad (4.8)$$

где $\varphi_i^{(I)}$, $\varphi_i^{(II)}$ — тензорная и векторная (по \mathbf{C}_i) части решения соответственно.

Тензорная часть решения $\varphi_i^{(I)}$ [2]

$$\varphi_i^{(I)} = -\frac{1}{n} B_i(W^2) \left(\mathbf{C}_i \mathbf{C}_i - \frac{1}{3} \delta C_i^2 \right) : \nabla \mathbf{v} \quad (4.9)$$

(определяется первым членом правой части (4.6)).

Система уравнений для B_i (B_i являются искомыми функциями)

$$\sum_j x_i x_j I_{ij} \left[B \left(\mathbf{C} \mathbf{C} - \frac{1}{3} \delta C^2 \right) \right] = \frac{2}{n} f_i^{(0)} \left(W_i W_i - \frac{1}{3} \delta W_i^2 \right), \quad (4.10)$$

$i = 1, 2, \dots, N.$

Тензор давлений

$$\begin{aligned} \mathbf{\Pi} &= \sum_i m_i \int f_i^{(0)} \mathbf{C}_i \mathbf{C}_i (1 + \varphi_i^{(I)}) d\mathbf{C}_i = p \delta + \boldsymbol{\pi}, \\ p &= \sum_i \frac{m_i}{3} \int f_i^{(0)} C_i^2 d\mathbf{C}_i = nkT. \end{aligned} \quad (4.11)$$

Бездивергентный тензор напряжений

$$\boldsymbol{\pi} = \sum_i m_i \int \left(\mathbf{C}_i \mathbf{C}_i - \frac{1}{3} \delta C_i^2 \right) f_i^{(0)} \varphi_i^{(I)} d\mathbf{C}_i = -2\eta \mathbf{S}, \quad (4.12)$$

где \mathbf{S} — тензор с компонентами

$$S_{mn} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_m}{\partial r_n} + \frac{\partial v_n}{\partial r_m} \right) - \frac{1}{3} \delta_{mn} \nabla \cdot \mathbf{v}; \quad m, n = 1, 2, 3.$$

Коэффициент вязкости

$$\eta = \frac{1}{15n} \sum_i m_i \int B_i \mathbf{C}_i^4 f_i^{(0)} d\mathbf{C}_i > 0. \quad (4.13a)$$

Разложение в ряд по полиномам Сонина

$$B_i \approx \frac{m_i}{2kT} \sum_{p=0}^{\xi-1} b_{i,p}(\xi) S_{5/2}^{(p)}(W_i^2). \quad (4.14)$$

Система линейных алгебраических уравнений для определения коэффициентов $b_{i,p}(\xi)$

$$\sum_{j=1}^N \sum_{q=0}^{\xi-1} H_{ij}^{pq} b_{j,q}(\xi) = \frac{2}{kT} x_i \delta_{p0}; \quad i = 1, \dots, N; \quad p = 0, \dots, \xi - 1. \quad (4.15)$$

Комментарии

1. Выражения для множителей H_{ij}^{pq} через парциальные интегральные скобки приведены в гл. 5.

2. Выражение для коэффициента вязкости при использовании разложения (4.15) имеет вид

$$\eta = \frac{kT}{2} \sum_i x_i b_{i,0}(\xi). \quad (4.13б)$$

3. В дальнейшем рассматривается лишь первое приближение метода Чепмена–Энскога, поэтому $\boldsymbol{\pi}^{(1)} = \boldsymbol{\pi}$, $\mathbf{V}_i^{(1)} = \mathbf{V}_i$ и т. д. Полная система уравнений газодинамики в этом приближении здесь для краткости называется системой уравнений Навье–Стокса, как это принято в литературе. Строго говоря, именами Навье и Стокса необходимо называть соответствующее уравнение движения [18].

4. Для приближенного решения систем линейных интегральных уравнений (4.10) и т. п. используются разложения в ряды по ортогональным полиномам Сонина $S_m^{(n)}(W_i^2)$. При разложении в бесконечные ряды получаются бесконечные системы алгебраических уравнений для коэффициентов разложения [1]. Определители этих систем также раскладываются в бесконечные ряды, которые обрываются на некотором члене разложения. Такой метод эквивалентен разложению искомых функций в конечные ряды [2]. При использовании принципа максимума и вариационного метода Ритца в качестве пробных функций применяются конечные отрезки рядов по полиномам [2].

Получающиеся системы алгебраических уравнений для коэффициентов рядов совпадают с системами, которые находятся данным методом.

5. В этом методе используются конечные отрезки рядов. Отрезок ряда (4.14) подставляется в левую часть уравнения (4.10), количество учитываемых слагаемых определяется числом ξ . Полученное выражение умножается скалярно на величину

$$S_{5/2}^{(m)}(W_i^2) \left(\mathbf{W}_i \mathbf{W}_i - \frac{1}{3} W_i^2 \boldsymbol{\delta} \right); \quad 0 \leq m \leq \xi; \quad \xi = 1, 2, \dots$$

и интегрируется по собственным скоростям частиц. Для определения коэффициентов разложения получается система линейных алгебраических уравнений (4.15). Число этих уравнений и значения коэффициентов разложений зависят от номера ξ (в виде записи $b_{i,p}(\xi)$ и т. п.). Аналогичная методика используется и при разложении по двойной системе полиномов (см. п. 4.1.2).

6. В классических монографиях по кинетической теории [1, 2, 5] алгебраические системы уравнений решались по правилу Крамера. Разработаны новые эффективные алгоритмы решения линейных систем алгебраических уравнений для коэффициентов разложения по полиномам, основанные на методе итераций [11, 19].

Векторная часть решения $\varphi_i^{(\text{II})}$

Векторная часть решения $\varphi_i^{(\text{II})}$ определяется вторым и третьим членами правой части уравнения (4.6).

1. *d*-представление решения $\varphi_i^{(\text{II})}$ [2]

Здесь под *d*-представлением понимается классическое выражение векторной (по \mathbf{C}_i) части возмущения функции распределения $\varphi_i^{(\text{II})}$ и, следовательно, диффузионной скорости и теплового потока через градиент температуры и диффузионные термодинамические силы:

$$\varphi_i^{(\text{II})} = -\frac{1}{n} A_i(W^2) \mathbf{C}_i \cdot \nabla \ln T - \frac{1}{n} \sum_j D_i^j(W^2) \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{d}_j. \quad (4.16)$$

Системы уравнений для искомых функций A_i , D_i^j

$$\begin{aligned} \sum_j x_i x_j I_{ij}(A\mathbf{C}) &= \frac{1}{n} f_i^{(0)} \left(W_i^2 - \frac{5}{2} \right) \mathbf{C}_i; \quad i = 1, 2, \dots, N, \\ \sum_j x_i x_j I_{ij}(D^k \mathbf{C}) &= \frac{1}{n_i} f_i^{(0)} \left(\delta_{ik} - \frac{\rho_i}{\rho} \right) \mathbf{C}_i; \quad i, k = 1, 2, \dots, N. \end{aligned} \quad (4.17)$$

Требования из условий единственности (4.5)

$$\sum_i m_i \int f_i^{(0)} C_i^2 \left(\frac{A_i}{D_i^j} \right) d\mathbf{C}_i = 0.$$

Ограничение на коэффициенты D_i^j

$$\sum_j \rho_j D_i^j = 0$$

Вектор диффузионной скорости компонента i

$$\mathbf{V}_i = \frac{1}{n_i} \int f_i^{(0)} \varphi_i^{(\Pi)} \mathbf{C}_i d\mathbf{C}_i = - \sum_j D_{ij} \mathbf{d}_j - D_{Ti} \nabla \ln T. \quad (4.18)$$

Вектор плотности теплового потока

$$\begin{aligned} \mathbf{q} &= \sum_i \frac{m_i}{2} \int f_i^{(0)} \varphi_i^{(\Pi)} \mathbf{C}_i C_i^2 d\mathbf{C}_i = \\ &= -\lambda' \nabla T - p \sum_i D_{Ti} \mathbf{d}_i + \frac{5}{2} kT \sum_i n_i \mathbf{V}_i. \end{aligned} \quad (4.19)$$

Коэффициенты многокомпонентной диффузии D_{ij} и термодиффузии D_{Ti}

$$D_{ij} = \frac{1}{3nn_i} \int D_i^j C_i^2 f_i^{(0)} d\mathbf{C}_i, \quad D_{Ti} = \frac{1}{3nn_i} \int A_i C_i^2 f_i^{(0)} d\mathbf{C}_i. \quad (4.20a)$$

Частичный коэффициент теплопроводности

$$\lambda' = \frac{k}{3n} \sum_i \int A_i C_i^2 \left(W_i^2 - \frac{5}{2} \right) f_i^{(0)} d\mathbf{C}_i > 0. \quad (4.21a)$$

Комментарии

1. При использовании методики [2] выполняются соотношения взаимности Онзагера (в отличие от [5]).

2. Коэффициент диффузии симметричен относительно перестановки индексов: $D_{ij} = D_{ji}$.

3. Коэффициенты самодиффузии $D_{ii} > 0$, в то время как коэффициенты взаимной диффузии ($i \neq j$) и термодиффузии могут быть как положительными, так и отрицательными, являясь линейно зависимыми:

$$\sum_i \rho_i D_{ij} = 0, \quad \sum_i \rho_i D_{Ti} = 0.$$

4. Для N -компонентной смеси имеется $\frac{1}{2} N(N-1)$ независимых коэффициентов диффузии и $N-1$ независимых коэффициентов термодиффузии.

5. Последний член формулы (4.19) соответствует потоку энтальпии, обусловленному диффузией частиц в системе координат, движущейся со среднемассовой скоростью. Он равен нулю при использовании системы координат, движущейся со средней скоростью газа [1, 2, 4].

Разложение искомых функций в ряды по полиномам Сонина

$$A_i \approx -\frac{m_i}{2kT} \sum_{p=0}^{\xi} a_{i,p}(\xi) S_{3/2}^{(p)}(W_i^2), \quad (4.22a)$$

$$D_i^j \approx \frac{m_i}{2kT} \sum_{p=0}^{\xi-1} d_{i,p}^j S_{3/2}^{(p)}(W_i^2). \quad (4.22b)$$

Коэффициенты разложений (4.22) $a_{i,p}(\xi)$ и $d_{i,p}^j(\xi)$ определяются следующими системами алгебраических уравнений (аналогично системе (4.15)):

$$\begin{aligned} \sum_j \sum_{q=0}^{\xi} \Lambda_{ij}^{pq} a_{j,q}(\xi) &= \frac{4}{5k} x_i \delta_{p1}; \quad i = 1, \dots, N; \quad p = 0, 1, \dots, \xi, \\ \sum_{j=1}^N \sum_{q=0}^{\xi-1} \Lambda_{ij}^{pq} d_{j,q}^k(\xi) &= \frac{8}{25k} \left(\delta_{ik} - \frac{\rho_i}{\rho} \right) \delta_{p0}; \quad i = 1, \dots, N; \quad p = 0, \dots, \xi - 1. \end{aligned} \quad (4.23)$$

При $p = 0$ к системам (4.23) добавляются соответственно уравнения

$$\sum_i \rho_i a_{i,0}(\xi) = 0; \quad \sum_i \rho_i d_{i,0}^k(\xi) = 0.$$

Коэффициенты многокомпонентной диффузии D_{ij} и термодиффузии D_{Ti}

$$D_{ij} \approx \frac{1}{2n} d_{i,0}^j(\xi); \quad D_{Ti} \approx -\frac{1}{2n} a_{i,0}(\xi). \quad (4.20b)$$

Частичный коэффициент теплопроводности

$$\lambda' \approx \frac{5}{4} k \sum_i x_i a_{i,1}(\xi). \quad (4.21b)$$

Формулы (4.20б) и (4.21б) получены с использованием разложений (4.22).

2. V -представление решения для $\varphi_i^{(\text{II})}$

Здесь под V -представлением понимается выражение векторной (по \mathbf{C}_i) части возмущения функции распределения $\varphi_i^{(\text{II})}$ и, следовательно, диффузионных термодинамических сил (соотношение Стефана–Максвелла) и плотности теплового потока через градиент температуры и диффузионные скорости.

Решение ищется в виде

$$\varphi_i^{(\text{II})} = \psi_i + \frac{m_i}{kT} \mathbf{V}_i \cdot \mathbf{C}_i. \quad (4.24)$$

Новая зависимая переменная ψ_i по определению диффузионной скорости \mathbf{V}_i удовлетворяет требованию $\int f_i^{(0)} \psi_i \mathbf{C}_i d\mathbf{C}_i = 0$, обеспечивающему выполнение условий единственности (4.5).

Представление диффузионной термодинамической силы через функции ψ_i

$$\mathbf{d}_i = \frac{1}{p} \int m_i \mathbf{C}_i \left[L_i \left(\frac{m_i}{kT} \mathbf{V}_i \cdot \mathbf{C}_i \right) + L_i(\psi) \right] d\mathbf{C}_i \quad (4.25)$$

получается скалярным умножением уравнения для $\varphi_i^{(\text{II})}$ на $m_i \mathbf{C}_i$ и интегрированием по \mathbf{C}_i .

Система уравнений для функций ψ

$$L_i^*(\psi) = f_i^{(0)} \left(W_i^2 - \frac{5}{2} \right) \mathbf{C}_i \cdot \nabla \ln T - L_i^*(\varphi^{(0)}) \quad (4.26)$$

(исключается \mathbf{d}_i и подставляется формула (4.24)).

Обозначение

Оператор L_i^* от функции $\chi(\mathbf{C}_i)$

$$L_i^*(\chi) \equiv L_i(\chi) - f_i^{(0)} \frac{1}{x_i p} \mathbf{C}_i \cdot \int L_i(\chi) m_i \mathbf{C}_i d\mathbf{C}_i.$$

Решение системы уравнений

Решение системы уравнений (4.26) для функций ψ_i представляется в виде

$$\begin{aligned} \psi_i = -\frac{1}{n} \tilde{A}_i(W^2) \mathbf{C}_i \cdot \nabla \ln T - \frac{1}{n} \sum_{k=1}^N \tilde{D}_i^k \mathbf{C}_i \cdot (\mathbf{V}_k - \mathbf{V}_i); \\ \sum_k \tilde{D}_i^k = 0. \end{aligned} \quad (4.27)$$

Системы уравнений для искоемых функций \tilde{A}_i , \tilde{D}_i^k

$$\begin{aligned} L_i^*(\tilde{A}\mathbf{C}) &= -n f_i^{(0)} \left(W_i^2 - \frac{5}{2} \right) \mathbf{C}_i, \\ L_i^*(\tilde{D}^l \mathbf{C}) &= n \left\{ L_i^l - f_i^{(0)} \frac{\mathbf{C}_i}{x_i p} \cdot \int L_i^l m_i \mathbf{C}_i d\mathbf{C}_i \right\}; \\ i, j, l &= 1, 2, \dots, N. \end{aligned} \quad (4.28)$$

Во втором уравнении (4.28) величина L_i^l дается выражением

$$L_i^l = \sum_{j=1}^N \int f_i^{(0)} f_j^{(0)} \frac{m_i}{kT} (\mathbf{C}_i' - \mathbf{C}_i) (\delta_{il} - \delta_{jl}) g_{ij} b db d\varphi d\mathbf{C}_j.$$

Переносные свойства и коэффициенты переноса
Вектор плотности теплового потока

$$\mathbf{q} = -\lambda \nabla T + p \sum_i \left(k_{Ti} + \frac{5}{2} x_i \right) \mathbf{V}_i. \quad (4.29)$$

Истинный коэффициент теплопроводности

$$\lambda = \frac{k}{3n} \sum_i \int \tilde{A}_i C_i^2 \left(W_i^2 - \frac{5}{2} \right) f_i^{(0)} d\mathbf{C}_i > 0. \quad (4.30a)$$

Термодиффузионное отношение

$$k_{Ti} = -\frac{1}{3n^2} \sum_j \int \tilde{D}_j^i C_j^2 \left(W_j^2 - \frac{5}{2} \right) f_j^{(0)} d\mathbf{C}_j. \quad (4.31a)$$

Соотношения Стефана–Максвелла

$$\mathbf{d}_i = \sum_j \alpha_{ij} (\mathbf{V}_j - \mathbf{V}_i) - k_{Ti} \nabla \ln T. \quad (4.32)$$

Выражения для коэффициентов α_{ij} рассматриваются в п. 5.3.5 и 5.3.7.

Соотношения между коэффициентами переноса

$$\begin{aligned} \lambda' &= \lambda + nk \sum_{ij} D_{ij} k_{Ti} k_{Tj}; \quad i, j = 1, \dots, N, \\ D_{Ti} &= \sum_j D_{ij} k_{Tj}; \quad \sum_i k_{Ti} = 0. \end{aligned} \quad (4.33)$$

Разложения коэффициентов \tilde{A}_i и \tilde{D}_i^j по полиномам Сонина

$$\tilde{A}_i \approx -\frac{m_i}{2kT} \sum_{p=1}^{\xi} \tilde{a}_{i,p}(\xi) S_{3/2}^{(p)}(W_i^2), \quad (4.34a)$$

$$\tilde{D}_i^j \approx \frac{m_i}{2kT} \sum_{p=1}^{\xi} \tilde{d}_{i,p}(\xi) S_{3/2}^{(p)}(W_i^2) \quad (4.34b)$$

(здесь в отличие от выражения (4.22) $p \geq 1$, а не $p \geq 0$).

Системы уравнений для коэффициентов разложений

$$\begin{aligned} \sum_j \sum_{q=1}^{\xi} \Lambda_{ij}^{pq} \tilde{a}_{j,q}(\xi) &= \frac{4}{5k} x_i \delta_{p1}; \quad i = 1, \dots, N; \quad p = 1, \dots, \xi, \\ \sum_{j=1}^N \sum_{q=1}^{\xi} \Lambda_{ij}^{pq} \tilde{d}_{j,q}^k(\xi) &= 2n\Lambda_{il}^{p0}, \\ \sum_{l=1}^N \tilde{d}_{j,q}^l(\xi) &= 0; \quad l = 1, \dots, N. \end{aligned} \quad (4.35)$$

Истинный коэффициент теплопроводности

$$\lambda \approx \frac{5}{4} k \sum_i x_i \tilde{a}_{i,1}(\xi). \quad (4.306)$$

Термодиффузионное отношение

$$k_{Ti} \approx \frac{5}{4n} \sum_j x_j \tilde{d}_{j,1}^i. \quad (4.316)$$

Коэффициенты переноса в первом приближении разложения по полиномам Сонина

Значения коэффициентов переноса η , D_{ij} и т. д. вычисляются, как правило, с учетом тех членов разложений, которые определяются значением $\xi = 1$. При этом они называются значениями в первом приближении разложения по полиномам Сонина и обозначаются так [2]:

$$[\eta]_1, \quad [D_{ij}]_1 \quad (4.36)$$

и т. д. При вычислении величин (4.36) учитываются только по одному (первому) слагаемому рядов (4.14), (4.226) соответственно. Однако для расчета первых приближений для частичного коэффициента теплопроводности $[\lambda']_1$ и коэффициентов термодиффузии $[D_{Ti}]_1$ необходимо учитывать по два члена соответствующих разложений [2]. Такая непоследовательность отсутствует в рамках V -приближения, когда каждый из коэффициентов $[\lambda]_1$, $[k_{Ti}]_1$ определяется только первым членом разложений (4.34а), (4.34б) соответственно. По известным значениям $[\lambda]_1$, $[k_{Ti}]_1$ и $[D_{ij}]_1$ можно найти коэффициенты $[\lambda']_1$ и $[D_{Ti}]_1$ при помощи формул (4.33).

Частные случаи

Однокомпонентный атомарный газ

Индексы i, j опускаются, $\mathbf{d}_i = 0$.

Тензор давлений

$$\mathbf{\Pi} = p \boldsymbol{\delta} - 2\eta \mathbf{S}.$$

Вектор плотности теплового потока

$$\mathbf{q} = -\lambda \nabla T.$$

Коэффициенты вязкости η и теплопроводности λ вычисляются по формулам, следующим из выражений (4.13), (4.21) соответственно.

Бинарная смесь

Учитываются соотношения

$$x_1 + x_2 = 1; \quad \mathbf{d}_1 = -\mathbf{d}_2; \quad \rho_1 \mathbf{V}_1 = -\rho_2 \mathbf{V}_2; \quad k_T \equiv k_{T1} = -k_{T2}.$$

Упрощаются выражения для η , λ и термодиффузионного отношения бинарной смеси k_T . Из формул (4.34), (4.31) следует, что

$$\mathbf{V}_1 - \mathbf{V}_2 = -\frac{1}{x_1 x_2} \mathcal{D}_{12} (\mathbf{d}_1 + k_T \nabla \ln T),$$

$$\mathbf{q} = -\lambda \nabla T + p k_T (\mathbf{V}_1 - \mathbf{V}_2) + \frac{5}{2} k T (n_1 \mathbf{V}_1 + n_2 \mathbf{V}_2),$$

где $\mathcal{D}_{12} = x_1 x_2 / \alpha_{12}$ есть коэффициент диффузии бинарной смеси (или коэффициент взаимной диффузии).

Комментарии

1. При исследовании газодинамических процессов с помощью уравнений Навье–Стокса применение V -представления для векторных переносных свойств является более эффективным, чем применение d -представления [5, 20–24].

2. При выводе выражений для векторных соотношений переноса в V -представлении получаются громоздкие выражения для коэффициентов переноса, если исходить из результатов d -представления, т. е. разрешить систему уравнений (4.20) относительно \mathbf{d}_i и поставить полученные соотношения Стефана–Максвелла в формулы (4.21). Сложность выражений быстро увеличивается с ростом порядка приближения ξ по полиномам Сонина, поэтому были разработаны прямые способы вывода этих соотношений [20–22].

3. Данное здесь изложение V -представления решения для $\varphi^{(\Pi)}$ базируется на методике [23, 24]. Полученные при помощи этой методики системы уравнений для коэффициентов разложений и выражения для λ , k_{Ti} и α_{ij} совпадают с найденными ранее Тирским и Колесниковым [20]. Их методика основана на преобразовании системы уравнений для коэффициентов разложений (4.22) (с учетом уравнений (4.6)).

4. В отличие от (4.22) разложения (4.34) не содержат слагаемого с $p = 0$, поэтому соотношения для определения коэффициента λ проще соотношений для коэффициента λ' .

5. Из первой формулы (4.35) следует, что обычно различие между коэффициентами λ' и λ мало в силу малости термодиффузионных отношений. Это различие может быть существенным при большом различии масс частиц [1].

6. Коэффициент λ' не поддается прямому экспериментальному определению: градиент температуры в смеси газов вызывает термодиффузию и, следовательно, градиенты концентраций и $\mathbf{d}_i \neq 0$. Поэтому теп-

ловой поток, обусловленный неоднородностью температуры, сопровождается тепловым потоком, обусловленным неоднородностью концентраций. В то же время коэффициент λ можно непосредственно измерить в стационарных условиях, так как в этих условиях все диффузионные скорости равны нулю, если смесь газов в целом покоится (см. также гл. 2).

7. Первое слагаемое формулы (4.29) для вектора плотности теплового потока соответствует теплопроводности, второе — диффузионному потоку тепла.

4.1.2. Смесь молекулярных газов

Кинетическое уравнение Больцмана в безразмерной форме

$$D_{i\alpha}^*(f_{i\alpha}^*) = \text{Kn}^{-1} J_{i\alpha}^*, \quad (4.37)$$

см. соотношения (3.16), (3.18). Число Kn определяется по характерному времени релаксации для рассматриваемых процессов.

Д о п у щ е н и я

1. Допущения и ограничения см. в гл. 3.
2. В операторе $J_{i\alpha}$ учитываются упругие и неупругие столкновения молекул

$$J_{i\alpha} = J_{i\alpha}^{\text{el}} + J_{i\alpha}^{\text{in}}.$$

3. При неупругих столкновениях происходят изменения вращательной и колебательной энергии молекул. Химические реакции и ионизация отсутствуют.

4. Поступательные, вращательные и колебательные времена релаксации компонентов смеси много меньше характерного газодинамического времени.

Комментарии

1. Используемая методика аналогична методике, изложенной выше (см. также [10, 25]).
2. Функция распределения в нулевом приближении

$$f_{i\alpha}^{(0)} = n_i \frac{S_{i\alpha}}{Q_i} \left(\frac{m_i}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp(-W_i^2 - \varepsilon_{i\alpha}), \quad (4.38)$$

$$Q_i = \sum_{\beta} S_{i\beta} \exp(-\varepsilon_{i\beta}); \quad \varepsilon_{i\beta} = \frac{E_{i\beta}}{kT}$$

равновесна по скоростям и внутренним энергиям молекул.

С л е д с т в и е

Справедливы соотношения (4.4), а также $P^{(0)} = p$.

Условия единственности разложения

Концентрации (плотности числа частиц) n_i , среднемассовая скорость \mathbf{v} и внутренняя энергия (отнесенная к плотности числа частиц

смеси) \mathcal{E} вычисляются в рамках нулевого приближения метода:

$$\begin{aligned} n_i &= \sum_{\alpha} \int f_{i\alpha}^{(0)} d\mathbf{c}_i; \\ \mathbf{v} &= \frac{1}{\rho} \sum_{i\alpha} m_i \int f_{i\alpha}^{(0)} \mathbf{c}_i d\mathbf{c}_i; \\ \mathcal{E} &= \frac{1}{n} \sum_{i\alpha} \int f_{i\alpha}^{(0)} \left(\frac{m_i}{2} \mathbf{c}_i^2 + E_{i\alpha} \right) d\mathbf{c}_i. \end{aligned} \quad (4.39)$$

В соответствии с последней формулой температура T определяется по значению полной внутренней энергии смеси \mathcal{E} . На следующие члены ряда Чепмена–Энскога $f_{i\alpha}^{(m)}$, $m \geq 1$, накладываются требования, аналогичные требованиям (4.5).

Функция распределения в первом приближении ($f_{i\alpha} = f_{i\alpha}^{(0)} + f_{i\alpha}^{(1)}$)

Система уравнений для нахождения поправок $f_{i\alpha}^{(1)} \equiv f_{i\alpha}^{(0)} \varphi_{i\alpha}$

$$\begin{aligned} L_{i\alpha}(\varphi) &= f_{i\alpha}^{(0)} \left\{ \frac{m_i}{kT} \left(\mathbf{C}_i \mathbf{C}_i - \frac{1}{3} \delta C_i^2 \right) : \nabla \mathbf{v} + \frac{n}{n_i} \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{d}_i + \right. \\ &\quad \left. + \left(W_i^2 - \frac{5}{2} + \varepsilon_{i\alpha} - \varepsilon_i \right) \mathbf{C}_i \cdot \nabla \ln T + \Gamma_{i\alpha} \nabla \cdot \mathbf{v} \right\}, \quad (4.40) \\ \Gamma_{i\alpha} &= \left(\frac{3}{2} k + c_V \right)^{-1} \left[c_V \left(\frac{2}{3} W_i^2 - 1 \right) - k(\varepsilon_{i\alpha} - \varepsilon_i) \right]. \end{aligned}$$

Определения

Линеаризованный самосопряженный оператор упругих и неупругих столкновений

$$\begin{aligned} L_{i\alpha}(\varphi) &= - \sum_{j\beta} I_{i\alpha j\beta}(\varphi), \\ i, j &= 1, 2, \dots, N; \quad \alpha = 0, 1, \dots, \Omega_i; \quad \beta = 0, 1, \dots, \Omega_j. \\ I_{i\alpha j\beta}(\varphi) &= \frac{1}{n_i n_j} \sum_{\gamma\delta} \int f_{i\alpha}^{(0)} f_{j\beta}^{(0)} (\varphi_{i\alpha} + \varphi_{j\beta} - \varphi'_{i\gamma} - \varphi'_{j\delta}) g_{ij} \sigma_{i\alpha j\beta}^{i\gamma j\delta} d\Omega d\mathbf{C}_j \end{aligned}$$

(приведенные выражения получаются путем линеаризации правой части формулы (3.22)).

Средняя внутренняя энергия молекул компонента i

$$\mathcal{E}_i = \frac{1}{Q_i} \sum_{\alpha} S_{i\alpha} \varepsilon_{i\alpha} \exp(-\varepsilon_{i\alpha}).$$

Теплоемкость при постоянном объеме, обусловленная внутренними степенями свободы молекул,

$$c_V = \sum_i x_i c_{Vi},$$

Теплоемкость при постоянном объеме компонента i , обусловленная внутренними степенями свободы молекул,

$$c_{Vi} = \frac{d}{dT} (\mathcal{E}_i kT).$$

Ω_i, Ω_j — числа квантовых состояний молекул компонентов i, j соответственно.

Решение системы уравнений (4.40)

$$\varphi_{i\alpha} = \varphi_{i\alpha}^{(I)} + \varphi_{i\alpha}^{(II)} + \varphi_{i\alpha}^{(III)}. \quad (4.41)$$

Тензорная часть решения $\varphi^{(I)}$

$$\varphi_{i\alpha}^{(I)} = -\frac{1}{n} B_{i\alpha}(W^2, \varepsilon) \left(\mathbf{C}_i \mathbf{C}_i - \frac{1}{3} \delta C_i^2 \right) : \nabla \mathbf{v}. \quad (4.42)$$

Комментарий

1. Для краткости под тензорной $\varphi^{(I)}$, векторной $\varphi^{(II)}$ и скалярной $\varphi^{(III)}$ частями решения понимаются тензорные, векторные и скалярные выражения по \mathbf{C}_i .

2. Решение (4.42) определяется первым членом правой части уравнения (4.40).

Система уравнений для $B_{i\alpha}$

$$\sum_{j\beta} x_i x_j I_{i\alpha j\beta} \left[B \left(\mathbf{C}_i \mathbf{C}_i - \frac{1}{3} \delta C_i^2 \right) \right] = \frac{2}{n} f_{i\alpha}^{(0)} \left(\mathbf{W}_i \mathbf{W}_i - \frac{1}{3} \delta W_i^2 \right), \quad (4.43)$$

$$i = 1, 2, \dots, N; \quad \beta = 0, 1, \dots, \Omega_j.$$

Вид скалярной части решения

$$\varphi_{i\alpha}^{(III)} = -\frac{1}{n} F_{i\alpha}(W^2, \varepsilon) \nabla \cdot \mathbf{v} \quad (4.44)$$

(определяется последним членом правой части уравнения (4.40)).

Система уравнений для $F_{i\alpha}$

$$\sum_{j\beta} x_i x_j I_{i\alpha j\beta}(F_{i\alpha}) = \frac{1}{n} f_{i\alpha}^{(0)} \Gamma_{i\alpha}. \quad (4.45)$$

Требования условий единственности разложения

$$\sum_{\alpha} \int f_{i\alpha}^{(0)} F_{i\alpha} d\mathbf{C}_i = 0; \quad \sum_{i\alpha} \int f_{i\alpha}^{(0)} F_{i\alpha} (W_i^2 + \varepsilon_{i\alpha}) d\mathbf{C}_i = 0. \quad (4.46)$$

Тензор давлений

$$\mathbf{\Pi} = \sum_{i\alpha} m_i \int \mathbf{C}_i \mathbf{C}_i f_{i\alpha}^{(0)} (1 + \varphi_{i\alpha}^{(I)} + \varphi_{i\alpha}^{(III)}) d\mathbf{C}_i = (p + p_V) \boldsymbol{\delta} + \boldsymbol{\pi}. \quad (4.47)$$

Бездивергентный тензор напряжений

$$\boldsymbol{\pi} = \sum_{i\alpha} m_i \int \left(\mathbf{C}_i \mathbf{C}_i - \frac{1}{3} \boldsymbol{\delta} C_i^2 \right) f_{i\alpha}^{(0)} \varphi_{i\alpha}^{(I)} d\mathbf{C}_i = -2\eta \mathbf{S}. \quad (4.48)$$

Коэффициент вязкости

$$\eta = \frac{1}{15n} \sum_{i\alpha} m_i \int B_{i\alpha} C_i^4 f_{i\alpha}^{(0)} d\mathbf{C}_i > 0. \quad (4.49a)$$

Объемная вязкость

$$p_V = -\varsigma \nabla \cdot \mathbf{v}. \quad (4.50)$$

Коэффициент объемной вязкости

$$\varsigma = \frac{1}{3n} \sum_{i\alpha} m_i \int F_{i\alpha} C_i^2 f_{i\alpha}^{(0)} d\mathbf{C}_i > 0. \quad (4.51a)$$

Комментарии

1. Принципиальным фактом является наличие объемной вязкости, отсутствующей в одноатомных газах.

2. Коэффициент объемной вязкости определяется неупругими столкновениями молекул.

Разложения функций $B_{i\alpha}$, $F_{i\alpha}$ в ряды по полиномам Сонина и Вальдмана–Трубенбахера

$$B_{i\alpha} \approx \frac{m_i}{2kT} \sum_{pm} b_{i,pm}(\xi) S_{5/2}^{(p)}(W_i^2) P^{(m)}(\varepsilon_{i\alpha}), \quad (4.52)$$

$$F_{i\alpha} \approx \sum_{pm} f_{i,pm}(\xi) S_{1/2}^{(p)}(W_i^2) P^{(m)}(\varepsilon_{i\alpha}), \quad (4.53)$$

$$\begin{aligned} i &= 1, 2, \dots, N; \quad \alpha = 0, 1, \dots, \Omega_i; \quad p = 0, 1, 2, \dots, \xi_p - 1; \\ m &= 0, 1, 2, \dots, \xi_m - 1. \end{aligned}$$

Системы линейных алгебраических уравнений для определения коэффициентов $b_{i,pm}$ и $f_{i,pm}$

$$\sum_{j=1}^N \sum_{qn} H_{ij}^{pqmn} b_{j,qn}(\xi) = \frac{2}{kT} x_i \delta_{p0} \delta_{m0}, \quad (4.54)$$

$$\sum_{j=1}^N \sum_{qn} \Phi_{ij}^{pqmn} f_{j,qn}(\xi) = x_i \left(\frac{3}{2} k + c_V \right)^{-1} (-c_V \delta_{p1} \delta_{m0} + c_{Vi} \delta_{p0} \delta_{m1}), \quad (4.55)$$

$$i = 1, 2, \dots, N; \quad p, q = 0, 1, 2, \dots, \xi_p - 1; \\ m, n = 0, 1, 2, \dots, \xi_m - 1.$$

Следствие требований (4.46)

$$f_{i,00} = 0; \quad \sum_i x_i \left(\frac{3}{2} k f_{i,10} + c_{Vi} f_{i,01} \right) = 0 \quad (4.56)$$

(эти требования накладываются на решения системы уравнений (4.55)).

Обозначения

ξ_p — число членов разложения в ряд по полиномам Сонина ($\xi_p \geq 1$)

ξ_m — число членов разложения в ряд по полиномам Вальдмана–Трубенбаха ($\xi_m \geq 1$)

Коэффициенты переноса

Коэффициент вязкости

$$\eta \approx \frac{kT}{2} \sum_i x_i b_{i,00}. \quad (4.496)$$

Коэффициент объемной вязкости

$$\varsigma \approx -kT \sum_i x_i f_{i,10}. \quad (4.516)$$

Векторная часть решения $\varphi_{i\alpha}^{(\Pi)}$

Векторная часть решения определяется вторым и третьим членами правой части уравнения (4.40).

1. d-представление решения для векторной части $\varphi_{i\alpha}$

$$\varphi_{i\alpha}^{(\Pi)} = -\frac{1}{n} A_{i\alpha}(W^2, \varepsilon_{i\alpha}) \mathbf{C}_i \cdot \nabla \ln T - \frac{1}{n} \sum_j D_{i\alpha}^j(W^2, \varepsilon_{i\alpha}) \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{d}_j \quad (4.57)$$

(например, [10, 25, 26]).

Системы уравнений для функций $A_{i\alpha}$, $D_{i\alpha}^j$

$$\sum_{j=1}^N \sum_{\beta} x_i x_j I_{i\alpha j\beta}(A\mathbf{C}) = \frac{1}{n} f_{i\alpha}^{(0)} \left(W_i^2 - \frac{5}{2} + \varepsilon_{i\alpha} - \varepsilon_i \right) \mathbf{C}_i, \\ \sum_{j=1}^N \sum_{\beta} x_i x_j I_{i\alpha j\beta}(D^k \mathbf{C}) = \frac{1}{n_i} f_{i\alpha}^{(0)} \left(\delta_{ik} - \frac{\rho_i}{\rho} \right) \mathbf{C}_i, \\ i, k = 1, 2, \dots, N, \quad \alpha = 0, 1, \dots, \Omega_i, \quad \beta = 0, 1, \dots, \Omega_j. \quad (4.58)$$

Требования из условий единственности

$$\sum_{i\alpha} \int f_{i\alpha}^{(0)} \left(\frac{A_{i\alpha}}{D_{i\alpha}^j} \right) W_i^2 d\mathbf{C}_i = 0, \quad j = 1, 2, \dots, N. \quad (4.59)$$

Ограничение, обусловленное линейной зависимостью векторов \mathbf{d}_i (т. е. $\sum_i \mathbf{d}_i = 0$)

$$\sum_j \rho_j D_{i\alpha}^j = 0.$$

Вектор диффузионной скорости компонента i

$$\mathbf{V}_i = \frac{1}{n_i} \sum_{\alpha} \int f_{i\alpha}^{(0)} \varphi_{i\alpha}^{(\Pi)} \mathbf{C}_i d\mathbf{C}_i = - \sum_j D_{ij} \mathbf{d}_j - D_{Ti} \nabla \ln T \quad (4.60)$$

Вектор плотности полного теплового потока

$$\begin{aligned} \mathbf{q} = \sum_{i\alpha} \int f_{i\alpha}^{(0)} \varphi_{i\alpha}^{(\Pi)} \mathbf{C}_i \left(\frac{m_i}{2} C_i^2 + E_{i\alpha} \right) d\mathbf{C}_i = \\ - \lambda' \nabla T - p \sum_i D_{Ti} \mathbf{d}_i + kT \sum_i \left(\frac{5}{2} + \varepsilon_i \right) n_i \mathbf{V}_i. \end{aligned} \quad (4.61)$$

Коэффициенты многокомпонентной диффузии D_{ij} и термодиффузии D_{Ti}

$$\left(\frac{D_{ij}}{D_{Ti}} \right) = \frac{1}{3nn_i} \sum_{\alpha} \int f_{i\alpha}^{(0)} \left(\frac{D_{i\alpha}^j}{A_{i\alpha}} \right) C_i^2 d\mathbf{C}. \quad (4.62a)$$

Частичный коэффициент теплопроводности

$$\lambda' = \frac{k}{3n} \sum_{i\alpha} \int f_{i\alpha}^{(0)} A_{i\alpha} \left(W_i^2 - \frac{5}{2} + \varepsilon_{i\alpha} - \varepsilon_i \right) C_i^2 d\mathbf{C}_i > 0. \quad (4.63a)$$

Разложения в ряды по полиномам

$$\begin{aligned} A_{i\alpha} &\approx - \frac{m_i}{2kT} \sum_{pm} a_{i,pm}(\xi) S_{3/2}^{(p)}(W_i^2) P^{(m)}(\varepsilon_{i\alpha}), \\ D_{i\alpha}^j &\approx \frac{m_i}{2kT} \sum_p d_{i,pm}^j(\xi) S_{3/2}^{(p)}(W_i^2) P^{(m)}(\varepsilon_{i\alpha}), \\ i, j &= 1, 2, \dots, N; \quad \alpha = 0, 1, \dots, \Omega_i; \quad p = 0, 1, 2, \dots, \xi_p - 1; \\ m &= 0, 1, 2, \dots, \xi_m - 1. \end{aligned} \quad (4.64)$$

Системы линейных алгебраических уравнений для коэффициентов разложений (4.64)

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^N \sum_{qn} \Psi_{ij}^{pqmn} a_{j,qn}(\xi) &= \frac{4}{5k} x_i \delta_{p1} \delta_{m0} + \frac{8}{25} x_i k^{-2} c_{Vi} \delta_{p0} \delta_{m1}, \\ \sum_{j=1}^N \sum_q \Psi_{ij}^{pqmn} d_{j,qn}^l(\xi) &= \frac{8}{25k} \left(\delta_{il} - \frac{\rho_i}{\rho} \right) \delta_{p0} \delta_{m0}, \\ i, l &= 1, 2, \dots, N; \quad p, q = 0, 1, 2, \dots, \xi_p - 1, \\ m, n &= 0, 1, 2, \dots, \xi_m - 1. \end{aligned} \quad (4.65)$$

Следствия требований (4.59)

$$\sum_{i=1}^N \rho_i a_{i,00} = 0; \quad \sum_{i=1}^N \rho_i d_{i,00}^j = 0; \quad j = 1, 2, \dots, N.$$

Коэффициенты многокомпонентной диффузии D_{ij} и термодиффузии D_{Ti} при использовании разложений по полиномам

$$\begin{pmatrix} D_{ij} \\ D_{Ti}} \end{pmatrix} \approx \frac{1}{2n} \begin{pmatrix} d_{i,0}^j \\ -a_{i,00} \end{pmatrix}. \quad (4.626)$$

Частичный коэффициент теплопроводности

$$\lambda' \approx \frac{5}{4} k \sum_i x_i a_{i,10} + \frac{1}{2} \sum_i x_i c_{Vi} a_{i,01}. \quad (4.636)$$

2. V-представление решения для векторной части $\varphi_{i\alpha}^{(\Pi)}$

Вместо выражения (4.24) решение принимает вид

$$\varphi_{i\alpha}^{(\Pi)} = \psi_{i\alpha} + \frac{m_i}{kT} \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{V}_i.$$

Требование к функциям $\psi_{i\alpha}$

$$\sum_{\alpha} \int f_{i\alpha}^{(0)} \psi_{i\alpha} \mathbf{C}_i d\mathbf{C}_i = 0.$$

Функции $\psi_{i\alpha}$ представляются через диффузионные скорости и ∇T аналогично выражению (4.27). Как и для одноатомных газов, может быть получена система уравнений для функций $\psi_{i\alpha}$ [24]. Соотношение Стефана–Максвелла дается формулой (4.32), но с более сложными уравнениями для коэффициентов [24]. Выражение для вектора плотности полного теплового потока

$$\mathbf{q} = -\lambda \nabla T + p \sum_i \left[k_{Ti} + x_i \left(\frac{5}{2} + \varepsilon_i \right) \right] \mathbf{V}_i \quad (4.66)$$

и соотношения для определения коэффициента теплопроводности λ и термодиффузионных отношений k_{Ti} приведены в [11, 19].

Комментарии

1. Приближенные выражения для коэффициентов H , Φ , Ψ , входящих в уравнения (4.54), (4.55), (4.65), в низших приближениях по полиномам приведены в работах [11, 19, 25, 26].

2. Минимальное число учитываемых членов разложений в ряды определяется тем, какие коэффициенты разложения входят в формулы для коэффициентов переноса.

3. Коэффициенты переноса зависят от температуры T , молярных долей x_i , сечений упругих и неупругих столкновений.

Частный случай**Допущения**

1. Возбуждены вращения и колебания молекул.

2. Вращательная энергия молекул не зависит от их колебательного состояния.

Следствия

$$1. \varepsilon_{i\alpha} = \varepsilon_{i\alpha_R} + \varepsilon_{i\alpha_V}; \quad \frac{S_{i\alpha}}{Q_i} = \frac{S_{i\alpha_R} S_{i\alpha_V}}{Q_i^R Q_i^V}; \quad \varepsilon_i = \varepsilon_i^R + \varepsilon_i^V.$$

2. В правой части формулы (4.40)

$$\varepsilon_{i\alpha} - \varepsilon_i = \varepsilon_{i\alpha_R} - \varepsilon_i^R + \varepsilon_{i\alpha_V} - \varepsilon_i^V; \quad c_V = c_V^R + c_V^V.$$

Комментарий

Верхние индексы R , V в этих формулах относятся к вращениям и колебаниям соответственно.

4.1.3. Смесь молекулярных химически реагирующих газов**Допущения**

1. В операторе $J_{i\alpha}$ (правой части уравнения (4.37)) учитываются также интегралы столкновений, возбуждающих химические реакции.

2. Электронное возбуждение частиц не рассматривается.

3. К неупругим столкновениям относятся столкновения, приводящие к обмену вращательной и колебательной энергией (RT-, RR-, TRV-, RV-, VV-, VT) и к бимолекулярным химическим реакциям, а также диссоциация и рекомбинация при тройных столкновениях.

4. Тройные столкновения, не приводящие к рекомбинации, не учитываются как менее вероятные.

5. Тройные столкновения, как и бинарные, считаются точечными и мгновенными.

6. Времена релаксации всех рассматриваемых процессов много меньше характерного газодинамического времени.

7. Внешние силы не учитываются.

8. Все частицы смеси газов принимают участие в химических реакциях.

Функция распределения в нулевом приближении

Локально равновесная функция распределения имеет вид

$$f_{i\alpha}^{(0)} = n_i \left(\frac{m_i}{2\pi kT} \right)^{3/2} \frac{S_{i\alpha}}{Q_i^\sigma} \exp(-W_i^2 - \varepsilon_{i\alpha}^\sigma). \quad (4.67)$$

Комментарий

В отличие от формулы (4.38), в данном случае концентрации химических компонентов смеси n_i удовлетворяют уравнениям равновесной химической кинетики, так что

$$n_i = n_i(n_d(\mathbf{r}, t), T(\mathbf{r}, t)). \quad (4.68)$$

Обозначения

$\varepsilon_{i\alpha}^\sigma$ — безразмерная энергия молекулы компонента i в состоянии с квантовыми числами α

$$\varepsilon_{i\alpha}^\sigma = \frac{1}{kT} (E_{i\alpha} + E_i^{\text{ch}}). \quad (4.69)$$

Верхний индекс σ указывает на то, что при химических реакциях продукты реакции могут образоваться в возбужденных состояниях.

Q_i^σ — статистическая сумма частицы компонента i

$$Q_i^\sigma = \sum_{\alpha} S_{i\alpha} \exp(-\varepsilon_{i\alpha}^\sigma).$$

E_i^σ — внутренняя энергия молекул компонента i , включающая энергию образования частиц

$$E_i^\sigma = \frac{1}{n_i} \sum_{\alpha} (E_{i\alpha} + E_i^{\text{ch}}) \int f_{i\alpha}^{(0)} d\mathbf{C}_i. \quad (4.70)$$

ε_i^σ — безразмерная внутренняя энергия молекул компонента i

$$\varepsilon_i^\sigma = \frac{1}{kT} E_i^\sigma. \quad (4.71)$$

N_a — число сортов непревращающихся частиц

n_d — концентрация непревращающихся частиц сорта d

$$n_d = \sum_{i=1}^{N_a} X_i^{(d)} n_i; \quad d = 1, 2, \dots, N_a.$$

N — число химических компонентов

$X_i^{(d)}$ — число непревращающихся частиц (в частности атомов) компонента d в молекуле компонента i

Комментарий

1. В химически реагирующей смеси аддитивными инвариантами столкновений (определяющих нулевое приближение) являются импульс, полная энергия, включающая энергию поступательных, внут-

ренных степеней свободы и энергию образования частиц, а также число атомов (или непревращающихся частиц) компонента d в молекуле компонента i (равное $X_i^{(d)}$) или в свободном состоянии (когда $X_d^{(d)} = 1$). Например, для любых частиц d при диссоциации–рекомбинации справедливо уравнение

$$X_i^{(d)} + X_j^{(d)} = X_{i'}^{(d)} + X_{j'}^{(d)} + X_{l'}^{(d)},$$

где i, j и i', j', l' означает химические компоненты частиц до и после столкновения.

2. Равновесные функции распределения в химически реагирующих газах и процессы переноса при слабых отклонениях от равновесия рассмотрены в работах [9, 27–30].

Условия единственности

По значениям $f_{i\alpha}^{(0)}$ вычисляются среднемассовая скорость частиц \mathbf{v} (см. выражение (4.39)), их концентрации n_d и удельная (в расчете на

единицу массы) энергия U :

$$n_d = \sum_{i\alpha} X_i^{(d)} \int f_{i\alpha}^{(0)} d\mathbf{C}_i; \quad d = 1, 2, \dots, N_a, \quad (4.72)$$

$$\rho U = \sum_{i\alpha} \int f_{i\alpha}^{(0)} \left(\frac{m_i C_i^2}{2} + E_{i\alpha} + E_i^{\text{ch}} \right) d\mathbf{C}_i. \quad (4.73)$$

С учетом формулы (4.73) температура T определяется по полной энергии U , включающей энергию образования. Последующие приближения не дают вклада в газодинамические переменные n_d , \mathbf{v} и U .

Комментарии

1. Массовая плотность газа выражается через концентрации (плотности числа частиц) n_d формулой

$$\rho = \sum_d m_d n_d = \sum_i m_i n_i,$$

где m_d — масса непревращающейся частицы (в частности атома).

2. Значения энергии образования частиц разных компонентов приводятся в справочниках. В химической кинетике [31] энергию образования E_{AB}^{ch} двухатомной молекулы AB определяют через энергии образования атомов E_A^{ch} и E_B^{ch} и энергию диссоциации D_{AB} :

$$E_{AB}^{\text{ch}} = -D_{AB} + E_A^{\text{ch}} + E_B^{\text{ch}},$$

а энергии E_A^{ch} , E_B^{ch} — через энергии диссоциации соответствующих гомоядерных молекул:

$$E_A^{\text{ch}} = \frac{1}{2} D_{A_2}, \quad E_B^{\text{ch}} = \frac{1}{2} D_{B_2}.$$

Из-за сохранения атомарного состава аддитивным инвариантом столкновения, приводящего к химической реакции, является не только полная внутренняя энергия $\frac{m_i C_i^2}{2} + E_{i\alpha} + E_i^{\text{ch}}$, но также и выражение $\frac{m_i C_i^2}{2} + E_{i\alpha} - D_i$.

Система уравнений газодинамики

Уравнения сохранения импульса и полной энергии и уравнения сохранения концентраций непревращающихся частиц:

$$\frac{dn_d}{dt} + n_d \nabla \cdot \mathbf{v} + \nabla \cdot n_d \mathbf{V}_d = 0; \quad d = 1, \dots, N_a. \quad (4.74)$$

Комментарии

1. Диффузионные скорости компонентов смеси \mathbf{V}_i и диффузионные скорости компонентов непревращающихся частиц (в частности атомов) \mathbf{V}_d связаны соотношением

$$n_d \mathbf{V}_d = \sum_i X_i^{(d)} n_i \mathbf{V}_i.$$

2. Уравнение неразрывности является следствием системы уравнений (4.74).

3. В смеси газа с бимолекулярными реакциями следствием системы (4.74) является также уравнение сохранения плотности числа частиц (концентрации частиц) смеси n .

Функция распределения в первом приближении

Система уравнений для возмущений функций распределения $\varphi_{i\alpha}$

$$L_{i\alpha}(\varphi) = D_{i\alpha} f_{i\alpha}^{(0)}. \quad (4.75)$$

Линеаризованный оператор столкновений $L_{i\alpha}(\varphi)$

$$L_{i\alpha}(\varphi) = L_{i\alpha}^{(1)} + L_{i\alpha}^{(2)},$$

где

$$L_{i\alpha}^{(1)} = \sum_{\chi} \int f_{i\alpha}^{(0)} f_{j\beta}^{(0)} (\varphi'_{k\gamma} + \varphi'_{l\delta} - \varphi_{i\alpha} - \varphi_{j\beta}) g_{ij} \sigma_{i\alpha j\beta}^{k\gamma l\delta} d\Omega d\mathbf{C}_j, \quad (4.76)$$

$$\chi = jkl\beta\gamma\delta$$

— оператор столкновений, при которых сохраняется число взаимодействующих частиц, в том числе столкновений, следствием которых являются бимолекулярные химические реакции;

$L_{i\alpha}^{(2)}$ — линеаризованный оператор столкновений, приводящих к диссоциации и рекомбинации [29],

$$L_{i\alpha}^{(2)} = \frac{1}{4} \sum_{\theta} \int f_{k\gamma}^{(0)} f_{l\delta}^{(0)} (\varphi'_{k\gamma} + \varphi'_{l\delta} - \varphi_{i\alpha} - \varphi_{j\beta} - \varphi_{n\varepsilon}) \times \\ \times W_{k\gamma l\delta}^{i\alpha j\beta n\varepsilon} d\mathbf{C}_j d\mathbf{C}_n d\mathbf{C}'_k d\mathbf{C}'_l +$$

$$+ \frac{1}{6} \sum_{\theta} \int f_{i\alpha}^{(0)} f_{j\beta}^{(0)} (\varphi'_{k\gamma} + \varphi'_{l\delta} + \varphi'_{n\varepsilon} - \varphi_{i\alpha} - \varphi_{j\beta}) \times \\ \times W_{i\alpha j\beta}^{k\gamma l\delta n\varepsilon} d\mathbf{C}_j d\mathbf{C}'_k d\mathbf{C}'_l d\mathbf{C}'_n, \quad (4.77)$$

$$\theta = j\beta k\gamma l\delta n\varepsilon; \quad i, j, k, l, n = 1, 2, \dots, N.$$

Значения наборов квантовых чисел $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \varepsilon$ изменяются от нуля до соответствующего максимального значения. Первое слагаемое формулы (4.77) для $L_{i\alpha}^{(2)}$ относится к рекомбинации, второе — к диссоциации. Для атомов греческие индексы опускаются.

Более общий вид оператора $L_{i\alpha}^{(2)}$ использован в [30, 32]. Доказаны симметрия ядра и разрешимость системы уравнений (4.75) [28–30].

Оператор $D_{i\alpha} f_{i\alpha}^{(0)}$

Правая часть уравнения (4.75) $D_{i\alpha} f_{i\alpha}^{(0)}$ находится с использованием уравнений сохранения нулевого (эйлерова) приближения и выражается через градиенты газодинамических переменных \mathbf{v}, T и n_d :

$$D_{i\alpha} f_{i\alpha}^{(0)} = f_{i\alpha}^{(0)} \left\{ \Xi_{i\alpha}^{(1)} + \Xi_{i\alpha}^{(2)} + \Xi_{i\alpha}^{(3)} \right\}. \quad (4.78)$$

Здесь первый и третий члены в скобках равны

$$\Xi_{i\alpha}^{(1)} = \frac{m_i}{kT} \left(\mathbf{C}_i \mathbf{C}_i - \frac{1}{3} \delta C_i^2 \right) : \nabla \mathbf{v}, \quad \Xi_{i\alpha}^{(3)} = \Gamma_{i\alpha} \nabla \cdot \mathbf{v}, \quad (4.79)$$

где

$$\Gamma_{i\alpha} = \frac{2}{3} W_i^2 - \sum_d \frac{\partial \ln n_i}{\partial \ln n_d} + \frac{1}{nT c_V} \left(W_i^2 - \frac{3}{2} + \varepsilon_{i\alpha}^\sigma - \varepsilon_i^\sigma + \frac{\partial \ln n_i}{\partial \ln T} \right) \times \\ \times \left[-\rho U - p + \sum_d \left(\frac{3}{2} kT + E_i^\sigma \right) \frac{\partial n_i}{\partial \ln n_d} \right],$$

$$c_V = \frac{1}{n} \frac{\partial \rho U}{\partial T} = \frac{3}{2} k + \sum_i x_i \frac{\partial E_i^\sigma}{\partial T} + \frac{1}{n} \sum_i \left(\frac{3}{2} kT + E_i^\sigma \right) \frac{\partial n_i}{\partial T}.$$

Величины $\varepsilon_{i\alpha}^\sigma, E_i^\sigma, \varepsilon_i^\sigma$ определены формулами (4.69)–(4.71).

Аналогично предыдущему разделу, слагаемые $\Xi_{i\alpha}^{(1)}, \Xi_{i\alpha}^{(3)}$ определяют вклады в полный тензор напряжений, который и здесь дается выражениями (4.47), (4.48), (4.50).

Коэффициенты вязкости определяются формулами, аналогичными формулам (4.49а), (4.51а).

Векторные переносные свойства определяет второй член формулы (4.78), который равен

$$\begin{aligned} \Xi_{i\alpha}^{(2)} = & \sum_d \frac{n_d}{n_i} \left(\frac{\partial n_i}{\partial n_d} - \frac{\rho_i}{\rho} \sum_j \frac{\partial n_j}{\partial n_d} \right) \mathbf{C}_i \cdot \nabla \ln n_d + \\ & + \left[W_i^2 - \frac{3}{2} + \varepsilon_{i\alpha}^\sigma - \varepsilon_i^\sigma + \frac{\partial \ln n_i}{\partial \ln T} - \frac{m_i T}{\rho} \sum_j \frac{\partial n_j}{\partial T} - \frac{n m_i}{\rho} \right] \mathbf{C}_i \cdot \nabla \ln T. \end{aligned} \quad (4.80)$$

Решение для векторной части $\varphi_{i\alpha}$ (d -представление)

$$\varphi_{i\alpha}^{(\Pi)} = -\frac{1}{n} A_{i\alpha} (W^2, \varepsilon_{i\alpha}^\sigma) \mathbf{C}_i \cdot \nabla \ln T - \frac{1}{n} \sum_d D_{i\alpha}^d (W^2, \varepsilon_{i\alpha}^\sigma) \mathbf{C}_i \cdot \nabla \ln n_d. \quad (4.81)$$

Вектор диффузионной скорости частиц компонента d

$$\begin{aligned} \mathbf{V}_d = & \frac{1}{n_d} \sum_{i\alpha} X_i^{(d)} \int f_{i\alpha}^{(0)} \varphi_{i\alpha}^{(\Pi)} \mathbf{C}_i d\mathbf{C}_i = -D_{Td} \nabla \ln T - \sum_{d'} D_{dd'} \nabla \ln n_{d'}, \\ & d' = 1, 2, \dots, N_a. \end{aligned} \quad (4.82)$$

Вектор диффузионной скорости частиц компонента i

$$\mathbf{V}_i = \frac{1}{n_i} \sum_\alpha \int f_{i\alpha}^{(0)} \varphi_{i\alpha}^{(\Pi)} \mathbf{C}_i d\mathbf{C}_i = -D_{Ti} \nabla \ln T - \sum_d D_{id} \nabla \ln n_d. \quad (4.83)$$

Вектор плотности полного теплового потока

$$\begin{aligned} \mathbf{q} = & \sum_{i\alpha} \int f_{i\alpha}^{(0)} \varphi_{i\alpha}^{(\Pi)} \mathbf{C}_i \left(\frac{m_i}{2} C_i^2 + E_{i\alpha} + E_i^{\text{ch}} \right) d\mathbf{C}_i = \\ & = -\lambda' \nabla T - p \sum_d D_{Td} \nabla \ln n_d + kT \sum_i \left(\frac{5}{2} + \varepsilon_i^\sigma \right) n_i \mathbf{V}_i. \end{aligned} \quad (4.84)$$

Комментарии

1. Функции $A_{i\alpha}$, $D_{i\alpha}^d$ зависят от квадратов безразмерных собственных скоростей частиц W_i^2 , от безразмерных энергий молекул $\varepsilon_{i\alpha}^\sigma$, включающих энергию образования, и от сечений всех столкновений.

2. Диффузионные скорости и плотность теплового потока определяются градиентами газодинамических переменных n_d , T .

Коэффициенты переноса

Коэффициент термодиффузии частиц компонента d

$$D_{Td} = \frac{1}{3nn_d} \sum_{i\alpha} X_i^{(d)} \int f_{i\alpha}^{(0)} A_{i\alpha} C_i^2 d\mathbf{C}_i.$$

Коэффициент взаимной диффузии частиц компонентов d и d'

$$D_{dd'} = \frac{1}{3nn_d} \sum_{i\alpha} X_i^{(d)} \int f_{i\alpha}^{(0)} D_{i\alpha}^{d'} C_i^2 d\mathbf{C}_i.$$

Коэффициент термодиффузии компонента i

$$D_{Ti} = \frac{1}{3nn_i} \sum_{\alpha} \int f_{i\alpha}^{(0)} A_{i\alpha} C_i^2 d\mathbf{C}_i.$$

Коэффициент диффузии компонента i относительно компонента d

$$D_{id} = \frac{1}{3nn_i} \sum_{\alpha} \int f_{i\alpha}^{(0)} D_{i\alpha}^d C_i^2 d\mathbf{C}_i.$$

Коэффициент термодиффузии в формуле (4.84) для плотности теплового потока

$$D_{Td} = \frac{1}{3n^2} \sum_{i\alpha} \int f_{i\alpha}^{(0)} D_{i\alpha}^d \left(W_i^2 - \frac{5}{2} + \varepsilon_{i\alpha}^{\sigma} - \varepsilon_i^{\sigma} \right) C_i^2 d\mathbf{C}_i.$$

Частичный коэффициент теплопроводности

$$\lambda' = \frac{k}{3n} \sum_{i\alpha} \int f_{i\alpha}^{(0)} A_{i\alpha} \left(W_i^2 - \frac{5}{2} + \varepsilon_{i\alpha}^{\sigma} - \varepsilon_i^{\sigma} \right) C_i^2 d\mathbf{C}_i.$$

Комментарии

1. Коэффициенты переноса зависят от сечений всех физико-химических процессов, протекающих в смеси.

2. Наиболее полный анализ решения в данной постановке проведен в статье [30]. Однако для матрицы коэффициентов $D_{dd'}$ не доказаны свойства симметрии и положительной определенности, для вектора диффузионной скорости \mathbf{V}_d и вектора плотности теплового потока \mathbf{q} не доказаны соотношения симметрии Онзагера (формулы (4.82), (4.84) соответственно).

3. Как это принято в газодинамике, в справочнике используются экстенсивные переменные (T, n_d) , $d = 1, \dots, N_a$. Однако именно в данном случае принципиальным является применение интенсивных переменных (γ_0, γ_d) [29]. Здесь $\gamma_0 = 1/kT$, а параметры γ_d следующим образом связаны с концентрациями химических компонентов смеси:

$$n_i = (2\pi m_i kT)^{3/2} \frac{Q_i}{h^3} \exp \left(\sum_d X_i^{(d)} \gamma_d \right), \quad (4.85)$$

где h — постоянная Планка. Вместо выражения (4.67) локально равновесная функция распределения запишется в виде

$$f_{i\alpha}^{(0)} = \left(\frac{m_i}{h} \right)^3 S_{i\alpha} \exp \left(W_i^2 - \varepsilon_{i\alpha}^{\sigma} + \sum_{d=1}^{N_a} X_i^{(d)} \gamma_d \right), \quad (4.86)$$

т.е. через инварианты столкновений. При подстановке этого выражения в операторы (3.19а), (3.19б) они тождественно обращаются в нуль. При использовании интенсивных переменных упрощается расчет

химического состава реагирующей смеси [29]. Для перехода к этим переменным применяются соотношения

$$\frac{\partial \ln n_i}{\partial \ln T} = \frac{3}{2} + \varepsilon_i^\sigma + T \sum_d X_i^{(d)} \frac{\partial \gamma_d}{\partial T}; \quad \frac{\partial \ln n_i}{\partial n_d} = \sum_{d'=1}^{N_a} X_i^{(d')} \frac{\partial \gamma_{d'}}{\partial n_d}.$$

Векторные переносные свойства линейно выражаются через градиенты параметров T , γ_d , при этом справедливы соотношения симметрии Онзагера.

4.2. Метод Грэда

Метод моментов для газа бесструктурных частиц использует разложение функции распределения частиц газа в ряд по ортогональной системе полиномов от собственной скорости частиц. В методе Грэда при построении такого разложения в качестве весовой функции (нулевого приближения) выбирается локальное максвелловское распределение, а в качестве полиномов используются тензорные полиномы Эрмита от безразмерной скорости частиц [33, 34]. Коэффициенты разложения с использованием условий ортогональности для полиномов оказываются выраженными через соответствующие моменты функции распределения. Уравнения моментов (или уравнения для коэффициентов разложения) образуют бесконечную цепочку зацепляющихся уравнений, поскольку в каждое из уравнений данного порядка входят коэффициенты (или моменты) более высокого порядка. Ограничение конечным числом членов ряда позволяет выразить моменты более высокого порядка через совокупность моментов, оставленных в разложении, и тем самым сделать систему уравнений моментов замкнутой.

Наиболее часто используемой на практике является система уравнений переноса в приближении 13 моментов, когда в разложении функции распределения оставлены члены с коэффициентами, выраженными через величины, имеющие явный физический смысл (см. ниже).

Назначение метода

Вывод замкнутой системы уравнений переноса (уравнений моментов) и получение выражений для коэффициентов переноса.

4.2.1. Смесь атомарных газов

Общее определение момента функции распределения

$$M_{ir_1 \dots r_n}^{(n)} = m_i \int C_{r_1} \dots C_{r_n} f_i d\mathbf{C}. \quad (4.87)$$

Комментарии

1. Момент функции распределения согласно соотношениям (3.8) связан со средним значением молекулярного признака $\phi_i(\mathbf{C}_i, \mathbf{r}, t)$:

$$M_{ir_1 \dots r_n}^{(n)} = n_i \langle \phi_{ir_1 \dots r_n}^{(n)} \rangle; \quad \phi_{ir_1 \dots r_n} = m_i C_{r_1} \dots C_{r_n}. \quad (4.88)$$

Поскольку вектор собственной скорости \mathbf{C}_i имеет три компоненты, каждый из индексов $r_1 \dots r_n$ может принимать значения 1, 2, 3. Момент функции распределения $\mathbf{M}^{(n)}$ является тензором n -го ранга.

2. Введенные ранее (см. гл. 3) макроскопические параметры компонента смеси i (массовая плотность, плотность диффузионного потока, тензор напряжений и удвоенный вектор плотности теплового потока) представляют собой первые несколько моментов функции распределения:

$$\begin{aligned} \rho_i &= M_i^{(0)}; \quad \rho_i V_{ir} = M_{ir}^{(1)}, \\ \Pi_{irs} &= p_i \delta_{rs} + \pi_{irs} = M_{irs}^{(2)}, \quad 2q_{ir} = M_{irss}^{(3)}. \end{aligned} \quad (4.89)$$

(Здесь и далее по повторяющимся индексам подразумевается суммирование.)

Разложение функции распределения [35, 36]

$$\begin{aligned} f_i &= f_i^{(0)} + f_i^{(1)} = f_i^{(0)}(1 + \varphi_i); \quad f_i^{(1)} = f_i^{(0)} \varphi_i, \\ f_i^{(0)} &= n_i \left(\frac{m_i}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp(-W_i^2); \quad \mathbf{W}_i = \mathbf{C}_i \sqrt{\frac{m_i}{2kT}}, \end{aligned} \quad (4.90)$$

$$\varphi_i = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \sigma_{mn} a_{ir_1 \dots r_m}^{mn}(\mathbf{r}, t) H_{ir_1 \dots r_m}^{mn}(\mathbf{W}_i). \quad (4.91)$$

Комментарии

1. Разложение функции распределения по системе ортогональных тензорных полиномов производится относительно локально равновесной максвелловской функции распределения $f_i^{(0)}$ как функции модуля собственной скорости частиц $\mathbf{C}_i = \mathbf{c}_i - \mathbf{v}$.

2. Температура смеси T определена соотношением

$$\frac{3}{2} nkT = \sum_i \frac{1}{2} n_i \langle m_i C_i^2 \rangle = \sum_i \frac{1}{2} M_{iss}^{(2)}. \quad (4.92)$$

3. Неприводимые тензорные полиномы Эрмита $H^{mn}(\mathbf{W})$ с точностью до нормировки представляют собой произведение полиномов Сонина $S_{m+1/2}^{(n)}(W^2)$ на тензорные сферические гармоники $P^{(m)}(\mathbf{W})$ [35, 36]:

$$H^{mn}(\mathbf{W}) = (-1)^n 2^{n+\frac{m}{2}} n! S_{m+1/2}^{(n)}(W^2) P^{(m)}(\mathbf{W}). \quad (4.93)$$

В определениях полиномов индекс i у переменной \mathbf{W}_i , соответствующий компоненту, для простоты опускается.

4. Полиномы Сонина определены во введении.

5. Первые несколько полиномов $P^{(m)}(W)$ имеют вид

$$\begin{aligned} P^{(0)} &= 1; \quad P_r^{(1)} = W_r; \quad P_{rs}^{(2)} = W_r W_s - \frac{1}{3} \delta_{rs} W^2, \\ P_{rs\ell}^{(3)} &= W_r W_s W_\ell - \frac{1}{5} W^2 (W_r \delta_{s\ell} + W_s \delta_{r\ell} + W_\ell \delta_{rs}). \end{aligned} \quad (4.94)$$

6. Нормировочный множитель σ_{mn} имеет вид

$$\sigma_{mn} = \frac{(2m+1)! (m+n)!}{n! (m!)^2 (2m+2n+1)!}.$$

Коэффициенты разложения функции распределения

Коэффициенты разложения в выражении (4.91) в соответствии с условиями ортогональности для полиномов $H_i^{mn}(W_i)$ определяются соотношениями [33, 36]

$$n_i a_i^{mn} = \int H_i^{mn}(W_i) f_i^{(0)} \varphi_i d\mathbf{c}_i = n_i \langle H_i^{mn}, \varphi_i \rangle. \quad (4.95)$$

Первые несколько коэффициентов разложения имеют вид [36]

$$\begin{aligned} a_i^{00} &= 0; \quad a_i^{01} = 3 \frac{T_i - T}{T}; \quad \mathbf{a}_i^{10} = \sqrt{\frac{m_i}{kT}} \mathbf{V}_i, \\ a_i^{20} &= \frac{\pi_i}{p_i}; \quad \mathbf{a}_i^{11} = 2 \gamma_i^{1/2} \frac{\mathbf{J}_{qi}}{p_i}. \end{aligned} \quad (4.96)$$

Переносные свойства

Диффузионная скорость i -го компонента

$$\mathbf{V}_i = \langle \mathbf{C}_i, \varphi_i \rangle. \quad (4.97)$$

Парциальный тензор вязких напряжений

$$\boldsymbol{\pi}_i = \rho_i \left\langle \left(\mathbf{C}_i \mathbf{C}_i - \frac{1}{3} \delta C_i^2 \right), \varphi_i \right\rangle. \quad (4.98)$$

Вектор плотности парциального теплового потока

$$\mathbf{q}_i = \frac{1}{2} \rho_i \langle C_i^2 \mathbf{C}_i, \varphi_i \rangle. \quad (4.99)$$

Вектор плотности приведенного парциального теплового потока

$$\mathbf{J}_{qi} = \mathbf{q}_i - \frac{5}{2} p_i \mathbf{V}_i. \quad (4.100)$$

Температура компонента i

$$kT_i = kT + \frac{1}{3} m_i \langle C_i^2, \varphi_i \rangle. \quad (4.101)$$

Комментарии

1. Коэффициенты разложения (4.95) линейно связаны с макроскопическими параметрами компонента смеси i (4.97)–(4.101), которые, в свою очередь, в соответствии с выражениями (4.89) связаны линейными соотношениями с моментами функции распределения.

2. Неравновесные параметры (4.97)–(4.99) обращаются в нуль при вычислении их на локально равновесной максвелловской функции распределения $f_i^{(0)}$, поэтому их значения определяются усреднением по поправке к функции распределения φ_i .

Система уравнений переноса

Система уравнений переноса следует из уравнений переноса (3.9)

$$\Gamma_i[H_i^{mn}] = R_i^{mn}. \quad (4.102)$$

Левая часть уравнений (4.102) определена выражением (3.10), в котором надо положить

$$\phi_i(\mathbf{C}_i, \mathbf{r}, t) = H_i^{mn}(\mathbf{W}_i) = H_i^{mn} \left[\left(\frac{m_i}{kT(\mathbf{r}, t)} \right)^{1/2} \mathbf{C}_i \right]. \quad (4.103)$$

Правая часть уравнений (4.102) имеет вид

$$R_i^{mn} = \int H_i^{mn} J_i d\mathbf{c}_i. \quad (4.104)$$

С учетом выражения (3.8) для интегральной части уравнения переноса молекулярного признака

$$R_i^{mn} = \sum_j [H_i^{mn}(\mathbf{C}'_i, r, t) - H_i^{mn}(\mathbf{C}_i, r, t)] f_i f_j g_{ij} \sigma_{ij}(g_{ij}, \chi) d\mathbf{c}_i d\mathbf{c}_j. \quad (4.105)$$

Комментарии

1. Используя определения (4.97) и соотношения (4.88), можно выразить левую часть (4.102) с помощью производных по времени и координате от коэффициентов $n_i a_i^{mn}$ или моментов различного порядка.

2. После подстановки в выражении (4.105) разложений (4.90)–(4.91) и выполнения соответствующего интегрирования по скоростям и углам в системе центра масс сталкивающихся частиц величина R_i^{mn} становится функционалом коэффициентов $n_i a_i^{mn}$, $n_j a_j^{mn}$. В конкретных приложениях обычно ограничиваются линейной зависимостью R_i^{mn} от этих коэффициентов.

3. Соответствующая полная система уравнений переноса (уравнений моментов) для однокомпонентного газа приведена в [33, 34], а для многокомпонентной газовой смеси — в [35, 37].

4.2.2. Функции распределения для однокомпонентного газа в приближении 13 моментов Грэда [33]

В приближении 13 моментов Грэда используется функция распределения с поправкой в виде

$$\varphi = \frac{m}{2kT} p^{-1} \pi : \left(\mathbf{C}\mathbf{C} - \frac{1}{3} \delta C^2 \right) + \frac{m}{5kT} p^{-1} \mathbf{q} \cdot \mathbf{C} \left(\frac{mC^2}{kT} - 5 \right). \quad (4.106)$$

Уравнения 13 моментов Грэда

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \mathbf{v} = 0, \quad (4.107)$$

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} + \nabla p + \nabla \pi = 0, \quad (4.108)$$

$$\rho c_V \frac{dT}{dt} + p \nabla \cdot \mathbf{v} + \pi_{rs} \frac{\partial v_r}{\partial x_s} + \nabla \cdot \mathbf{q} = 0, \quad (4.109)$$

$$\frac{d\pi_{rs}}{dt} + \pi_{rs} \nabla \cdot \mathbf{v} + 2 \left\{ \pi_{r\ell} \frac{\partial \mathbf{v}_s}{\partial x_\ell} \right\} + \frac{4}{5} \left\{ \frac{\partial q_r}{\partial x_s} \right\} + 2pS_{rs} = -\frac{1}{\tau_\eta} \pi_{rs}, \quad (4.110)$$

$$\begin{aligned} \frac{dq_r}{dt} + \frac{7}{5} q_s \frac{\partial \mathbf{v}_r}{\partial x_s} + \frac{2}{5} q_s \frac{\partial \mathbf{v}_s}{\partial x_r} + \frac{7}{5} q_r \nabla \cdot \mathbf{v} + \frac{kT}{m} \frac{\partial \pi_{rs}}{\partial x_s} + \\ + \frac{7}{2} \frac{k}{m} \pi_{rs} \frac{\partial T}{\partial x_s} + \frac{5}{2} \frac{k}{m} p \frac{\partial T}{\partial x_r} = -\frac{2}{3} \frac{1}{\tau_\eta} q_r. \end{aligned} \quad (4.111)$$

Комментарии

1. Приближение 13 моментов к функции распределения (4.106) соответствует использованию пяти макроскопических параметров (ρ , \mathbf{v} и T), которые входят в $f^{(0)}$, и конечного числа членов разложения (4.91) с коэффициентами a_{rs}^{20} и a_r^{11} . Получаемая замкнутая система уравнений переноса (уравнений моментов) состоит из уравнений сохранения и уравнений для π_{rs} и q_r .

2. При записи уравнений моментов предполагается, что внешние силы отсутствуют.

3. В левой части уравнений (4.110) используются сокращенные обозначения

$$\{A_r B_s\} = \frac{1}{2} (A_r B_s + B_r A_s) - \frac{1}{3} A_\ell B_\ell \delta_{rs}; \quad S_{rs} = \left\{ \frac{\partial u_r}{\partial x_s} \right\}.$$

4. Параметр τ_η выражается с помощью соотношения $[\eta]_1 = p\tau_\eta$ через коэффициент вязкости однокомпонентного газа $[\eta]_1$, рассчитанный в первом приближении метода Чепмена–Энскога, и имеет порядок величины характерного среднего времени между столкновениями частиц.

Линеаризация уравнений моментов

Уравнения (4.108)–(4.109) могут быть линеаризованы с учетом условия

$$\frac{\ell_0}{\ell^*} \ll 1, \quad (4.112)$$

что соответствует малым числам Кнудсена:

$$\frac{d\pi_{rs}}{dt} + \frac{4}{5} \left\{ \frac{\partial q_r}{\partial x_s} \right\} + 2pS_{rs} = -\frac{1}{\tau_\eta} \pi_{rs}, \quad (4.113)$$

$$\frac{dq_r}{dt} + \frac{kT}{m} \frac{\partial \pi_{rs}}{\partial x_s} + \frac{5}{2} \frac{k}{m} p \frac{\partial T}{\partial x_r} = -\frac{2}{3} \frac{1}{\tau_\eta} q_r. \quad (4.114)$$

Комментарии

1. Уравнения (4.113)–(4.114) получаются также, если в основу вывода уравнений переноса положить линеаризованное уравнение Больцмана [2, 38].

2. Если наряду с условием (4.112) выполнено условие $\tau_0/\tau^* \ll 1$, т.е. макроскопические параметры газа слабо меняются за времена порядка характерного времени свободного пробега частиц в газе, то в уравнениях (4.113)–(4.114) можно опустить производные по времени от моментов по сравнению с правыми частями уравнений. В этом случае получаются линейные соотношения вида [34, 38]

$$\begin{aligned}\pi_{rs} &= -2[\eta]_1 \left(S_{rs} + \frac{2}{5} \frac{1}{p} \left\{ \frac{\partial q_r}{\partial x_s} \right\} \right), \\ q_r &= -[\lambda]_1 \left(\frac{\partial T}{\partial x_r} + \frac{2}{5} \frac{T}{p} \frac{\partial \pi_{rs}}{\partial x_s} \right),\end{aligned}\tag{4.115}$$

где $[\lambda]_1 = \frac{15}{4} \frac{k}{m} [\eta]_1$ — коэффициент теплопроводности однокомпонентного газа, вычисленный в первом приближении метода Чепмена–Энскога.

3. Если в соответствии с условием (4.112) пренебречь также вторыми членами в правых частях уравнений (4.113), которые, как правило, имеют второй порядок малости по числу Кнудсена, то они переходят в обычные линейные соотношения метода Чепмена–Энскога

$$\boldsymbol{\pi} = -2[\eta]_1 \mathbf{S}, \quad \mathbf{q} = -[\lambda]_1 \nabla T,\tag{4.116}$$

которые совпадают с выражениями, полученными в разд. 4.1. Исключение составляет рассмотрение установившегося вязкого течения газа. В этом случае из уравнения движения (4.108) следует $\frac{\partial \pi_{rs}}{\partial x_s} = -\frac{\partial p}{\partial x_r}$, и выражение для теплового потока (4.115) записывается в виде [38]

$$\mathbf{q} = -[\lambda]_1 \left(\nabla T - \frac{2}{5} \frac{T}{p} \nabla p \right).\tag{4.117}$$

4. Приближенные решения уравнений 13 моментов можно получить также методом, аналогичным методу Чепмена–Энскога, используя то обстоятельство, что запись уравнений (4.110), (4.111) в безразмерных переменных приводит к появлению в правых частях уравнений членов порядка Kn^{-1} . При условии $\text{Kn} \ll 1$ величины $\boldsymbol{\pi}$ и \mathbf{q} и их производные по времени разлагаются в ряд по малому параметру. В первом приближении по числу Кнудсена получаются обычные линейные соотношения (4.114). Следующее приближение дает уравнения Барнетта и т. д. [1, 2].

4.2.3. Приближение $13N$ моментов для многокомпонентной смеси [36] (N — число компонентов в смеси)

Разложение функции распределения

$$\begin{aligned} \varphi_i = & \frac{m_i}{kT} \mathbf{V}_i \cdot \mathbf{C}_i + 12 \frac{T_i - T}{T} \left(\frac{m_i}{kT} C_i^2 - 3 \right) + \\ & + \frac{1}{2} \frac{m_i}{2p_i kT} \pi_i : \left(\mathbf{C}_i \mathbf{C}_i - \frac{1}{3} \delta C_i^2 \right) + \\ & + \frac{1}{5} \frac{m_i}{2p_i kT} \mathbf{J}_{qi} \cdot \mathbf{C}_i \left(\frac{m_i}{kT} C_i^2 - 5 \right), \quad p_i = n_i kT_i. \end{aligned} \quad (4.118)$$

Система линеаризованных уравнений моментов

$$\frac{d}{dt} \rho_i V_{ir} + p d_{ir} + \frac{\partial \pi_{irs}}{\partial x_s} - \frac{\rho_i}{\rho} \frac{\partial \pi_{rs}}{\partial x_s} = R_{ir}^{(1)}, \quad (4.119)$$

$$\frac{d\pi_{irs}}{dt} + 2p_i \varepsilon_{rs} + \frac{4}{5} \left\{ \frac{\partial q_{ir}}{\partial x_s} \right\} = R_{irs}^{(2)}, \quad (4.120)$$

$$\frac{dJ_{qir}}{dt} + \frac{5}{2} \frac{k}{m_i} p_i \frac{\partial T}{\partial x_r} + \frac{kT}{m_i} \frac{\partial \pi_{irs}}{\partial x_s} = R_{ir}^{(3)}. \quad (4.121)$$

Правые части уравнений переноса

$$\mathbf{R}_i^{(1)} = -\frac{5}{2} \left[\frac{5}{2} \sum_j \Lambda_{ij}^{00} \mathbf{V}_j - \sum_j \Lambda_{ij}^{10} \frac{\mathbf{J}_{qj}}{p_j} \right], \quad (4.122)$$

$$R_{irs}^{(2)} = -p^2 \sum_j H_{ij}^{00} \frac{\pi_{jrs}}{p_j}, \quad (4.123)$$

$$\mathbf{R}_i^{(3)} = -\frac{5}{2} \frac{m_i p^2}{kT} \left[\frac{5}{2} \sum_j \Lambda_{ij}^{10} \mathbf{V}_j - \sum_j \Lambda_{ij}^{11} \frac{\mathbf{J}_{qj}}{p_j} \right]. \quad (4.124)$$

Комментарии

1. Приближение $13N$ моментов соответствует использованию пяти макроскопических параметров ($\rho_i = m_i n_i$, \mathbf{v} и T), которые входят в $f_i^{(0)}$ и конечного числа членов разложения (4.91) с коэффициентами, отвечающими совокупности моментов (4.96). Полная замкнутая система уравнений моментов (уравнений переноса) в приближении $13N$ моментов состоит из уравнений сохранения (1.5), (1.18) (уравнений неразрывности, движения и энергии) и уравнений (4.119)–(4.121) для неравновесных параметров $\rho_i \mathbf{V}_i$, π_{irs} и \mathbf{J}_{qi} .

2. Уравнения (4.119)–(4.121), как и уравнения (4.113)–(4.114) для однокомпонентного газа, записаны в линеаризованном приближении, когда в уравнениях моментов опущены квадратичные по числу Кнудсена члены, соответствующие произведениям неравновесных параметров

на градиенты скорости и температуры. Полная (нелинеаризованная) система уравнений для многокомпонентной смеси приводится в [36, 37].

3. Эквивалентный способ получения аналогичной системы уравнений основан на использовании линеаризованного кинетического уравнения Больцмана для поправки к функции распределения φ_i . Уравнения (4.119)–(4.121) получаются в этом случае, если умножить линеаризованное кинетическое уравнение на соответствующие неприводимые полиномы Эрмита, по которым производится разложение, и проинтегрировать по скоростям частиц [36, 37].

4. В общем случае система уравнений моментов должна быть дополнена уравнениями для $(T_i - T)$. Анализ показывает, что отличие температур компонент смеси T_i от общей для газовой смеси температуры T имеет квадратичный порядок малости по числу Кнудсена [36].

5. Коэффициенты H_{ij}^{00} , Λ_{ij}^{01} , Λ_{ij}^{10} и Λ_{ij}^{11} в правых частях уравнений (4.122)–(4.124) совпадают с соответствующими коэффициентами в системах алгебраических уравнений (4.15) и (4.35), получаемых методом Чепмена–Энскога. Выражения для них через парциальные интегральные скобки от полиномов Сонина приведены в гл. 5.

Линейные соотношения переноса

$$\sum_{j=1}^N \Lambda_{ij}^{00} \mathbf{v}_j - \frac{2}{5} \sum_{j=1}^N \Lambda_{ij}^{01} \frac{\mathbf{J}_{qi}}{p_i} = -\frac{4}{25} \frac{T}{p} \mathbf{d}_i, \quad (4.125)$$

$$\sum_{j=1}^N \Lambda_{ij}^{10} \mathbf{v}_j - \frac{2}{5} \sum_{j=1}^N \Lambda_{ij}^{11} \frac{\mathbf{J}_{qi}}{p_i} = \frac{2}{5} \frac{n_i}{n} \nabla \ln T, \quad (4.126)$$

$$p^2 \sum_j H_{ij}^{00} \frac{\pi_{jrs}}{p_j} = -2p_i S_{rs}. \quad (4.127)$$

Комментарий

Линейные соотношения переноса (4.125)–(4.127) следуют из линеаризованных уравнений моментов (4.119)–(4.121) в предположении, что макроскопические параметры компонентов смеси слабо меняются на расстояниях и за времена порядка средней характерной длины и времени свободного пробега частиц между столкновениями. Как и в случае однокомпонентного газа, в этих уравнениях могут быть опущены члены с производными от моментов по времени, малые по сравнению с правыми частями уравнений, а также производные по координатам от π_{irs} и q_{ir} , которые, как правило, имеют второй порядок малости по числу Кнудсена. Соотношения (4.125)–(4.127) можно также получить из линеаризованных уравнений моментов в первом приближении по числу Кнудсена, если использовать разложение величин $\rho_i \mathbf{v}_i$, π_{irs} и \mathbf{J}_{qi} в ряд по степеням малых чисел Кнудсена [36].

4.2.4. Соотношения переноса для многокомпонентной смеси в высших приближениях метода моментов

Разложение поправки к функции распределения [36, 39]

$$\varphi_i = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n 2^{n+\frac{m}{2}} n! \left[\sigma_{1n} \mathbf{a}_i^{1n} S_{3/2}^{(n)} \left(\frac{1}{2} W_i^2 \right) \mathbf{W}_i + \right. \\ \left. + \sigma_{2n} a_{irs}^{2n} S_{5/2}^{(n)} \left(\frac{1}{2} W_i^2 \right) \left(W_{ir} W_{is} - \frac{1}{3} W_i^2 \delta_{rs} \right) \right]. \quad (4.128)$$

Уравнения для коэффициентов разложения \mathbf{a}_j^{1n}

$$- \sum_j \sum_{\ell=0}^{\xi-1} C_{ij}^{10\ell} \mathbf{a}_j^{1\ell} = \left(\frac{kT_i}{m_i} \right) \frac{p}{kT} \mathbf{d}_i, \quad (4.129)$$

$$\sum_j \sum_{\ell=0}^{\xi-1} C_{ij}^{11\ell} \mathbf{a}_j^{1\ell} = -5 \left(\frac{kT_i}{m_i} \right)^{1/2} \frac{p_i}{kT_i} \nabla \ln T, \quad (4.130)$$

$$\sum_j \sum_{\ell=0}^{\xi-1} C_{ij}^{1n\ell} \mathbf{a}_j^{1\ell} = 0, \quad 1 < n \leq \xi - 1. \quad (4.131)$$

Уравнения для коэффициентов разложения a_{jrs}^{2n}

$$\sum_j \sum_{\ell=0}^{\xi-1} C_{ij}^{20\ell} a_{jrs}^{2\ell} = -2n_i \varepsilon_{rs}, \quad (4.132)$$

$$\sum_j \sum_{\ell=0}^{\xi-1} C_{ij}^{2n\ell} a_{jrs}^{2\ell} = 0 \quad (0 < n \leq \xi - 1). \quad (4.133)$$

Коэффициенты $C_{ij}^{1n\ell}$ и $C_{ij}^{2n\ell}$ являются линейными комбинациями интегральных скобок от полиномов Сонина [36, 20]. При этом $C_{ij}^{1n\ell}$ связаны с использованными ранее коэффициентами $\Lambda_{ij}^{n\ell}$ (см. также гл. 5) соотношениями

$$\Lambda_{ij}^{n\ell} = \frac{8}{75} \frac{T}{p^2} m_i^{1/2} m_j^{1/2} (Q_{1n\ell})^{-1} C_{ij}^{1n\ell}, \quad Q_{1n\ell} = (-2)^{n+\ell} \frac{4n!(\ell+1)!}{(2\ell+3)!}, \quad (4.134)$$

а коэффициенты $C_{ij}^{2n\ell}$ выражаются через $H_{ij}^{n\ell}$ как

$$H_{ij}^{n\ell} = \frac{2}{5} \frac{kT}{p^2} (Q_{2n\ell})^{-1} C_{ij}^{2n\ell}, \quad Q_{2n\ell} = (-2)^{n+\ell} \frac{4n!(\ell+1)!}{(2\ell+5)!}. \quad (4.135)$$

Комментарии

1. Разложение (4.128) является частным случаем общего разложения поправки к функции распределения (4.91), в котором используются тензорные сферические гармоники $P^{(m)}(\mathbf{W})$ с $m \leq 2$, т. е. разложение

не включает тензорные полиномы более чем второго ранга. При этом порядок полиномов Сонина n может быть произвольным.

2. Системы алгебраических уравнений для коэффициентов \mathbf{a}_j^{1n} и a_{jrs}^{2n} получаются из линеаризованных систем уравнений моментов для N -компонентной смеси, записываемых для произвольного числа моментов или коэффициентов разложения с $m = 1, 2$. При тех же предположениях, что и в рассмотренном выше приближении 13 моментов для простого газа, в этих уравнениях пренебрегается производными по времени от моментов по сравнению с правыми частями уравнений, а также производными по координатам от моментов более высокого порядка. Другой способ получения этих соотношений заключается в последовательном применении к полной системе уравнений моментов процедуры, аналогичной методу Чепмена–Энскога, с использованием разложения по малому параметру (эффективному числу Кнудсена) [36].

3. Приближение 13 N моментов соответствует учету лишь коэффициентов \mathbf{a}^{10} , a_{rs}^{20} и \mathbf{a}^{11} в разложении (4.128). При этом

$$\mathbf{a}_i^{10} = \left(\frac{m_i}{kT_i} \right)^{1/2} \mathbf{V}_i; \quad a_{irs}^{20} = \frac{\pi_{irs}}{p_i}; \quad \mathbf{a}_i^{11} = 2\gamma_i^{1/2} \frac{\mathbf{J}_{qi}}{p_i}. \quad (4.136)$$

Другая форма представления уравнения для коэффициентов разложения φ_i

Систему уравнений (4.129)–(4.131) удобно представить в форме, когда вместо первых двух коэффициентов \mathbf{a}_i^{10} и \mathbf{a}_i^{11} используются величины \mathbf{V}_i и \mathbf{J}_{qi}/p_i , связанные с этими коэффициентами соотношениями (4.136):

$$\sum_{j=1}^N \Lambda_{ij}^{00} \mathbf{V}_j - \frac{2}{5} \sum_{j=1}^N \Lambda_{ij}^{01} \frac{\mathbf{J}_{qj}}{p_j} + \sum_{j=1}^N \sum_{\ell=2}^{\xi-1} \Lambda_{ij}^{0\ell} \mathbf{b}_j^{1\ell} = -\frac{4}{25} \frac{T}{p} \mathbf{d}_i, \quad (4.137)$$

$$\sum_{j=1}^N \Lambda_{ij}^{10} \mathbf{V}_j - \frac{2}{5} \sum_{j=1}^N \Lambda_{ij}^{11} \frac{\mathbf{J}_{qi}}{p_i} + \sum_{j=1}^N \sum_{\ell=2}^{\xi-1} \Lambda_{ij}^{1\ell} \mathbf{b}_j^{1\ell} = \frac{2}{5} \frac{n_i}{n} \nabla \ln T, \quad (4.138)$$

$$\sum_{j=1}^N \Lambda_{ij}^{n0} \mathbf{V}_j - \frac{2}{5} \sum_{\beta=1}^N \Lambda_{ij}^{n1} \frac{\mathbf{J}_{qj}}{p_j} + \sum_{j=1}^N \sum_{\ell=2}^{\xi-1} \Lambda_{ij}^{n\ell} \mathbf{b}_j^{1\ell} = 0, \quad 1 < n \leq \xi-1. \quad (4.139)$$

Аналогично, вместо уравнений (4.132)–(4.133) с учетом второго соотношения (4.136) получаются уравнения

$$p^2 \left(\sum_{j=1}^N H_{ij}^{00} \frac{\pi_{jrs}}{p_j} + \sum_{j=1}^N \sum_{\ell=1}^{\xi-1} H_{ij}^{0\ell} b_{jrs}^{2\ell} \right) = -2p_i \varepsilon_{rs}, \quad (4.140)$$

$$p^2 \left(\sum_{j=1}^N H_{ij}^{n0} \frac{\pi_{jrs}}{p_j} + \sum_{j=1}^N \sum_{\ell=1}^{\xi-1} H_{ij}^{n\ell} b_{jrs}^{2\ell} \right) = 0, \quad 0 < n \leq \xi-1. \quad (4.141)$$

Комментарии

1. Коэффициенты $\Lambda_{ij}^{0\ell}$, $\Lambda_{ij}^{1\ell}$, $\Lambda_{ij}^{n\ell}$ и $H^{0\ell}$, $H_{ij}^{n\ell}$ в правых частях (4.137)–(4.139) совпадают с соответствующими коэффициентами в системах алгебраических уравнений (4.35) и (4.15), получаемых методом Чепмена–Энскога. Выражения для них через парциальные интегральные скобки от полиномов Сонина приведены в гл. 5.

2. Система алгебраических уравнений (4.137)–(4.139) может быть разрешена относительно параметров \mathbf{V}_i и \mathbf{J}_{qi} для получения линейных соотношений, связывающих эти параметры с диффузионной термодинамической силой \mathbf{d}_i и градиентом температуры ∇T . Это приводит к тем же результатам, что и рассмотренное выше в настоящей главе \mathbf{d} -представление метода Чепмена–Энскога. Приближение 13N моментов соответствует тому, что коэффициенты D_{ij} и D_i^T в этих выражениях определяются с точностью, соответствующей учету двух членов в разложении по полиномам Сонина ($\xi = 2$).

3. Решение системы линейных алгебраических уравнений (4.140)–(4.141) приводит к обычному соотношению для тензора вязких напряжений $\boldsymbol{\pi} = -2\eta\mathbf{S}$, которое совпадает с результатом (4.12), получаемым методом Чепмена–Энскога.

Результаты решения уравнений

Ниже приводятся результаты решения уравнений (4.137)–(4.139), которые соответствуют V-представлению метода Чепмена–Энскога, рассмотренному выше в настоящей главе. Эти результаты были впервые получены в работе [20] с помощью модификации обычного метода Чепмена–Энскога и в работах [36, 39] на основе метода моментов.

Вектор плотности полного теплового потока

$$\mathbf{q} = -[\lambda]_{\xi} \nabla T + p \sum_i \left(\frac{5}{2} \frac{n_i}{n} + [k_{Ti}]_{\xi} \right) \mathbf{V}_i. \quad (4.142)$$

Соотношения Стефана–Максвелла

$$-p \mathbf{d}_i = \sum_{k \neq i}^N \frac{n_i n_k kT}{n [D_{ik}]_1} \{1 - [\Delta_{ik}]_{\xi}\} (\mathbf{V}_i - \mathbf{V}_k) + p [k_{Ti}]_{\xi} \frac{1}{T} \nabla T. \quad (4.143)$$

Комментарии

1. При получении соотношений (4.142)–(4.143) сначала решаются уравнения (4.138)–(4.139) в результате чего \mathbf{J}_{qi} и $\mathbf{b}_i^{1\ell}$ выражаются через разности диффузионных скоростей компонентов $\mathbf{V}_i - \mathbf{V}_j$ и градиент температуры ∇T . Суммирование \mathbf{J}_{qi} по i с учетом определения (4.99) приводит к выражению для вектора плотности полного теплового потока смеси \mathbf{q} , который совпадает с (4.29). Подстановка полученных выражений для \mathbf{J}_{qi} и $\mathbf{b}_j^{1\ell}$ в (4.137) приводит к системе уравнений Стефана–Максвелла (4.143), которая аналогична уравнениям (4.32).

2. Порядок приближения ξ , в котором рассчитываются кинетические коэффициенты $[\eta]_\xi$, $[\lambda]_\xi$, $[\Delta_{ik}]_\xi$ и $[k_{Ti}]_\xi$ определяется числом коэффициентов $\mathbf{b}_j^{1\ell}$ и $b_{jrs}^{2\ell}$ и соответствующих им уравнений в системах уравнений (4.137)–(4.141).

Список литературы к главе 4

1. Чепмен С., Каулинг Т. Математическая теория неоднородных газов. — М.: Изд-во иностр. лит., 1960. — 510 с.
2. Ферцигер Дж., Капер Г. Математическая теория процессов переноса в газах. — М.: Мир, 1976. — 554 с.
3. Черчиньяни К. Теория и приложения уравнения Больцмана. — М.: Мир, 1978. — 495 с.
4. Вальдман Л. Явления переноса в газах при среднем давлении // Термодинамика газов. — М.: Машиностроение, 1970. — С. 169–414.
5. Гиршфельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей. — М.: Изд-во иностр. лит., 1961. — 930 с.
6. Коган М. Н. Динамика разреженного газа. — М.: Наука, 1967. — 440 с.
7. McCourt F. R. W., Beenakker J. J. M., Kohler W. E. et al. Nonequilibrium Phenomena in Polyatomic Gases. V.1, 2. — Oxford: Clarendon Press, 1990. — 500 p.; 350 p.
8. Жданов В. М., Алиевский М. Я. Процессы переноса и релаксации в молекулярных газах. — М.: Наука, 1989. — 332 с.
9. Валландер С. В., Нагнибеда Е. А., Рыдалевская М. А. Некоторые вопросы кинетической теории химически реагирующей смеси газов. — Л.: Изд-во ЛГУ, 1977. — 280 с.
10. Андерсен Г. Вывод уравнений гидродинамики из уравнения Больцмана // Кинетические процессы в газах и плазме / Под ред. А. Хохштимы. — М.: Атомиздат, 1972. — С. 27–51.
11. Ern A., Giovangigli V. Multicomponent Transport Algorithms. — New-York–Berlin–Heidelberg: Springer-Verlag, 1994. — 427 p.
12. Галкин В. С., Шавалиев М. Ш. Газодинамические уравнения высших приближений метода Чепмена–Энскога // Изв. РАН. Мех. жидк. и газов. 1998. № 4. С. 3–28.
13. Брагинский С. И. Явления переноса в полностью ионизованной двухтемпературной плазме // ЖЭТФ. 1957. Т. 32, № 2. С. 459–472.
14. Chmielewski R. M., Ferziger J. K. Transport properties of a nonequilibrium partially ionized gas // Phys. Fluids. 1967. V. 10, № 2. P. 364–371.
15. Галкин В. С. К выводу уравнений двухтемпературной газодинамики модифицированным методом Чепмена–Энскога // Изв. АН СССР. Мех. жидк. и газов. 1981. № 1. С. 145–153.
16. Галкин В. С., Макашев Н. К. О кинетическом выводе уравнений газодинамики многокомпонентных смесей легких и тяжелых частиц // Изв. РАН. Мех. жидк. и газов. 1994. № 1. С. 180–200.
17. Богаевский В. Н., Повзнер А. Я. Алгебраические методы в нелинейной теории возмущений. — М.: Наука, 1987. — 255 с.

18. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Гидродинамика. — М.: Наука, 1986. — 736 с.
19. Giovangigli V. Multicomponent Flow Modeling. — Boston–Basel–Berlin: Birkhauser, 1999. — 321 p.
20. Колесников А. Ф., Тирский Г. А. Уравнения гидродинамики для частично ионизованных многокомпонентных смесей газов с коэффициентами переноса в высших приближениях // Молекулярная газодинамика. — М.: Наука, 1982. — С. 20–44.
21. Колесников А. Ф., Тирский Г. А. Соотношения Стефана–Максвелла для диффузионных потоков плазмы в магнитном поле // Изв. АН СССР. Мех. жидк. и газов. 1977. № 4. С. 148–154.
22. Тирский Г. А. Уравнения гидродинамики для химически равновесных течений многоэлементной плазмы с точными коэффициентами переноса // Прикл. матем. и мех. 1999. Т. 63, вып. 6. С. 899–922.
23. Галкин В. С., Макашев Н. К. Модификация первого приближения метода Чепмена–Энскога для смеси газов // Изв. РАН. Мех. жидк. и газов. 1992. № 4. С. 178–185.
24. Галкин В. С. Преобразования уравнений метода Чепмена–Энскога и векторные соотношения переноса для смесей молекулярных газов // Прикл. матем. и мех. 2007. Т. 71, вып. 2. С. 301–320.
25. Monchick L., Yun K. S., Mason E. A. Formal kinetic theory of transport phenomena in polyatomic gas mixtures // J. Chem. Phys. 1963. V. 39, No. 3. P. 654–669.
26. Нагнибеда Е. А., Кустова Е. В. Кинетическая теория процессов переноса и релаксации в неравновесных потоках реагирующих газов. — СПб.: Изд-во СПбГУ, 2003. — 272 с.
27. Людвиг Г., Хейль М. Теория пограничного слоя в газах с диссоциацией и ионизацией // Проблемы механики. — М.: Изд-во иностр. лит., 1963. — С. 39–99.
28. Рыдалевская М. А. Формальное кинетическое описание смесей газов с диссоциацией и рекомбинацией // Аэродинамика разреженных газов. Вып. 9. — Л.: Изд-во ЛГУ, 1978. — С. 5–20.
29. Рыдалевская М. А. Статистические и кинетические модели в физико-химической газодинамике. — СПб.: Изд-во СПбГУ, 2003. — 248 с.
30. Ern A., Giovangigli V. The kinetic chemical equilibrium regime // Physica A. 1998. V. 260. P. 49–72.
31. Кондратьев В. Н. Структура атомов и молекул. — М.: Физматлит, 1954. — 524 с.
32. Пилюгин Н. Н., Тирский Г. А. Динамика ионизованного излучающего газа. — М.: Изд-во МГУ, 1989. — 312 с.
33. Grad H. On the kinetic theory of rarefied gases // Comm. Pure and Appl. Math. 1949. V. 2, № 4. P. 331–407.
34. Grad H. Kinetic theory of gases // Handbuch der Physik/Ed. S. Flugge. — Springer Verlag, Berlin, 1958 (пер. в сб.: Термодинамика газов. — М.: Машиностроение, 1970. — С. 5–109).

-
35. Жданов В.М., Каган Ю.М., Сазыкин А.А. Влияние вязкого переноса импульса на диффузию в газовой смеси // ЖЭТФ. 1962. Т.42. С. 857–867.
 36. Жданов В.М. Процессы переноса в многокомпонентной плазме. — М.: ФМЛ, 2009. — 280 с.
 37. Zhdanov V. M. Transport Processes in Multicomponent Plasma. — London–New York: Taylor and Francis, 2002. — 296 p.
 38. Жданов В.М., Ролдугин В.И. Неравновесная термодинамика и кинетическая теория разреженных газов // Успехи физ. наук. 1998. Т. 168, № 4. С. 407–438.
 39. Жданов В.М., Тирский Г.А. Применение метода моментов к выводу уравнений переноса газов и плазмы с коэффициентами переноса в высших приближениях // Прикл. матем. и мех. 2003. Т. 67, вып. 3. С. 406–433.

Глава 5

КОЭФФИЦИЕНТЫ ПЕРЕНОСА АТОМАРНЫХ И МОЛЕКУЛЯРНЫХ ГАЗОВ И ГАЗОВЫХ СМЕСЕЙ

Согласно методу Чепмена–Энскога коэффициенты переноса газов и газовых смесей выражаются через интегральные скобки полиномов Сонина [1–5]. Интегральные скобки являются линейными комбинациями интегралов переноса, называемых также Ω -интегралами (см. гл. 6). Используются также приведенные Ω^* -интегралы. Приведенные Ω^* -интегралы определяются как отношение обычных Ω -интегралов к $[\Omega]_{\text{тв. сф.}}$ -интегралам, вычисленным для модели твердых сфер диаметром σ . Конкретные выражения для транспортных сечений $Q^{(\ell)}(g)$ и Ω -интегралов для различных применяемых на практике моделей потенциалов взаимодействия молекул, атомов, электронов и ионов приводятся в гл. 6. Там же приведены используемые в этой главе безразмерные комбинации Ω^* -интегралов A_{ij}^* , B_{ij}^* и др. Выражения, связывающие интегральные скобки с Ω -интегралами, приведены в разд. 5.5.

5.1. Однокомпонентный атомарный газ

Общее выражение Ω -интегралов и приведенных Ω^* -интегралов

$$\Omega^{(\ell, s)} = \left(\frac{kT}{\pi m} \right)^{1/2} \int_0^\infty \exp(-\gamma^2) \gamma^{2s+3} Q^{(\ell)}(g) d\gamma,$$

$$Q^{(\ell)}(g) = 2\pi \int_0^\infty [1 - \cos^\ell \chi(b, g)] b db, \quad (5.1)$$

$$\gamma = \left(\frac{m}{2kT} \right)^{1/2} g.$$

$$\Omega^{(\ell, s)*} = \frac{\Omega^{(\ell, s)}}{[\Omega^{(\ell, s)}]_{\text{тв. сф.}}},$$

$$[\Omega^{(\ell, s)}]_{\text{тв. сф.}} = \left(\frac{kT}{\pi m} \right)^{1/2} \frac{(s+1)!}{2} \left[1 - \frac{1 + (-1)^\ell}{2(\ell+1)} \right] \pi \sigma^2. \quad (5.2)$$

Обозначения

m — масса атома

$Q^{(\ell)}(g)$ — набор обобщенных транспортных сечений упругого рассеяния атомов газа

γ — приведенная относительная скорость g при упругом столкновении

l — показатель степени в выражении для обобщенного транспортного сечения

s — порядок использованного приближения в разложении по полиномам Сонина

5.1.1. Коэффициент вязкости

Коэффициент сдвиговой вязкости η входит в линейное соотношение, связывающее тензор вязких напряжений $\boldsymbol{\pi}$ с тензором скоростей сдвига \mathbf{S} :

$$\boldsymbol{\pi} = -2\eta\mathbf{S}, \quad S_{rs} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_r}{\partial x_s} + \frac{\partial v_s}{\partial x_r} - \frac{2}{3} \delta_{rs} \nabla \cdot \mathbf{v} \right). \quad (5.3)$$

Определяющие уравнения

Коэффициент вязкости в ξ -м приближении по числу полиномов Сонина

$$[\eta]_{\xi} = \frac{1}{2} kT b_0(\xi). \quad (5.4)$$

Коэффициенты $b_0(\xi)$ находятся из решения системы линейных алгебраических уравнений

$$\sum_{q=0}^{\xi-1} H^{pq} b_q(\xi) = \frac{2}{kT} \delta_{p0}; \quad p = 0, 1, \dots, \xi - 1. \quad (5.5)$$

Коэффициенты H^{pq} выражаются через интегральную скобку

$$H^{pq} = \frac{2}{5kT} \left[S_{5/2}^{(p)}(W^2) \left(WW - \frac{1}{3} W^2 \boldsymbol{\delta} \right); S_{5/2}^{(q)}(W^2) \left(WW - \frac{1}{3} W^2 \boldsymbol{\delta} \right) \right]. \quad (5.6)$$

Расчетные формулы

Коэффициент вязкости в первом приближении ($\xi = 1$)

$$[\eta]_1 = \frac{1}{H^{00}} \quad \text{или} \quad [\eta]_1 = \frac{5kT}{8\Omega^{(2,2)}}. \quad (5.7)$$

Коэффициент вязкости, выраженный через приведенные Ω^* -интегралы,

$$[\eta]_1 = \frac{5}{16} \frac{(\pi m k T)^{1/2}}{\pi \sigma^2 \Omega^{(2,2)*}(T^*)}. \quad (5.8)$$

Обозначения

σ — диаметр столкновений

$T^* = kT/\varepsilon$ — приведенная температура

ε/k — параметр потенциальной функции межмолекулярного взаимодействия в виде (5.11).

Коэффициент вязкости во втором приближении ($\xi = 2$)

$$[\eta]_2 = [\eta]_1 f_\eta^{(2)}; \quad f_\eta^{(2)} = 1 + \frac{(H^{01})^2}{H^{00} H^{11} - (H^{01})^2}. \quad (5.9)$$

Выражения для интегральных скобок H^{pq}

$$\begin{aligned} H^{00} &= \frac{1}{[\eta]_1}; \quad H^{01} = \frac{1}{[\eta]_1} \left[\frac{7}{4} - 2E^* \right], \\ H^{11} &= \frac{1}{[\eta]_1} \left[\frac{301}{48} - 7E^* + 5H^* \right]. \end{aligned} \quad (5.10)$$

Комментарии

1. Интегральные скобки H^{pq} в общем случае определяются формулой (5.6), конкретные выражения для них в виде линейных комбинаций Ω -интегралов приводятся в разд. 5.5.

2. Величины E^* , H^* являются безразмерными комбинациями Ω -интегралов (см. (6.11)).

3. При записи выражения (5.8) предполагается, что зависимость потенциальных функций межмолекулярного взаимодействия от расстояния R имеет вид

$$U(R) = \varepsilon f\left(\frac{R}{\sigma}\right), \quad (5.11)$$

что приводит к зависимости $\Omega^{(2,2)*}$ от приведенной температуры T^* . Этому условию удовлетворяет большинство моделей потенциалов взаимодействия, рассматриваемых в гл. 6. Для модели твердых сфер $\Omega^{(2,2)*} = 1$.

4. Учет второго приближения для модели твердых сфер дает поправку к коэффициенту вязкости $\sim 1,5\%$.

5.1.2. Коэффициент теплопроводности

Коэффициент теплопроводности λ входит в линейное соотношение, связывающее вектор плотности теплового потока с градиентом температуры:

$$\mathbf{q} = -\lambda \nabla T. \quad (5.12)$$

Определяющие уравнения

Коэффициент теплопроводности в ξ -м приближении по числу полиномов Сонина

$$[\lambda]_\xi = \frac{5}{4} k a_1(\xi). \quad (5.13)$$

Коэффициенты $a_1(\xi)$ находятся из решения системы ξ линейных алгебраических уравнений

$$\sum_{q=1}^{\xi} \Lambda^{pq} a_q(\xi) = \frac{4}{5k} \delta_{p1}; \quad p = 1, \dots, \xi. \quad (5.14)$$

Коэффициенты Λ^{pq} определяются интегральной скобкой

$$\Lambda^{pq} = \frac{8m}{75k^2T} [S_{3/2}^{(p)}(W^2)W; S_{3/2}^{(q)}(W^2)W]. \quad (5.15)$$

Выражения для Λ^{pq} в виде линейных комбинаций Ω -интегралов приводятся в разд. 5.5.

Расчетные формулы

Первое приближение ($\xi = 1$)

$$[\lambda]_1 = \frac{1}{\Lambda^{11}} \quad \text{или} \quad [\lambda]_1 = \frac{25c_V kT}{16\Omega^{(2,2)}}. \quad (5.16)$$

Коэффициент теплопроводности, выраженный через приведенные Ω^* -интегралы,

$$[\lambda]_1 = \frac{25}{32} \frac{(\pi m k T)^{1/2}}{\pi \sigma^2 \Omega^{(2,2)*}(T^*)} c_V, \quad (5.17)$$

где $c_V = 3k/2m$ — удельная теплоемкость (теплоемкость единицы массы) однокомпонентного атомарного газа.

Второе приближение ($\xi = 2$)

$$[\lambda]_2 = [\lambda]_1 f_{\lambda}^{(2)}, \quad (5.18)$$

$$f_{\lambda}^{(2)} = 1 + \frac{(\Lambda^{12})^2}{\Lambda^{11} \Lambda^{22} - (\Lambda^{12})^2}. \quad (5.19)$$

Выражения для интегральных скобок Λ^{pq}

$$\begin{aligned} \Lambda^{11} &= \frac{1}{[\lambda]_1}, \\ \Lambda^{22} &= \frac{1}{[\lambda]_1} \left[\frac{77}{16} - 7E^* + 5H^* \right], \\ \Lambda^{12} &= \frac{1}{[\lambda]_1} \left[\frac{7}{4} - 2E^* \right]. \end{aligned} \quad (5.20)$$

Фактор (или отношение, поправка) Эйкена

$$f = \lambda / \eta c_V. \quad (5.21)$$

Комментарии

1. Учет второго приближения для модели твердых сфер дает поправку к коэффициенту теплопроводности $\sim 2,5\%$. Учет третьего приближения не представляется необходимым. Фактор Эйкена при учете второго приближения меняется не более чем на $0,2\%$.

2. Фактор Эйнена для одноатомных газов в первом приближении оказывается постоянной величиной:

$$[f]_1 = \frac{[\lambda]_1}{[\eta]_1 c_V} = \frac{5}{2}, \quad (5.22)$$

что позволяет определять значения коэффициента теплопроводности в первом приближении $[\lambda]_1$, исходя из рассчитанных для различных моделей значений коэффициента вязкости $[\eta]_1$.

5.2. Однокомпонентный молекулярный газ

Как и для атомарного газа, коэффициенты переноса молекулярного газа могут быть выражены с помощью интегральных скобок, которые, в свою очередь, оказываются линейными комбинациями обобщенных Ω -интегралов или интегральных выражений вида [6]:

$$\Omega = \left(\frac{kT}{\pi m} \right)^{1/2} \langle F \rangle = \left(\frac{kT}{\pi m} \right)^{1/2} Q_{\text{in}}^{-2} \sum_{\alpha\beta\kappa\delta} \int_0^\pi \sin \chi \, d\chi \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty F \gamma^3 \times \\ \times \sigma_{\alpha\beta}^{\kappa\delta}(\gamma, \chi, \varphi) \exp(-\gamma^2 - \varepsilon_{1\alpha} - \varepsilon_{2\beta}) \, d\gamma. \quad (5.23)$$

Обозначения

m — масса молекулы

Q_{in} — статистическая сумма по внутренним степеням свободы молекул

F — некоторая функция скорости молекулы, находящейся в α -м квантовом состоянии

$\sigma_{\alpha\beta}^{\kappa\delta}$ — дифференциальное сечение рассеяния, при котором молекула 1 переходит из состояния α в состояние κ , а молекула 2 из состояния β в состояние δ

$\varepsilon_{1\alpha}, \varepsilon_{2\beta}$ — энергии квантовых состояний молекул 1 и 2, отнесенные к величине kT .

Приводимые ниже выражения для коэффициентов переноса однокомпонентного молекулярного газа соответствуют по точности расчета первому неисчезающему приближению в разложении по полиномам Сонина и Вальдмана–Трубенбахера [7].

5.2.1. Коэффициент сдвиговой вязкости

Коэффициент сдвиговой вязкости η входит в линейное соотношение, которое имеет тот же вид (5.3), что и в случае атомарных газов.

Расчетные формулы

$$[\eta]_1 = \frac{5kT}{8\Omega_\eta}, \quad (5.24)$$

где $\Omega_\eta = \left(\frac{kT}{\pi m}\right)^{1/2} \left\langle \gamma^2 (\gamma^2 - \gamma'^2 \cos^2 \chi) - \frac{1}{6} (\Delta\varepsilon)^2 \right\rangle$,

$$\Delta\varepsilon = \varepsilon_{2\delta} + \varepsilon_{1\kappa} - \varepsilon_{1\alpha} - \varepsilon_{2\beta}.$$

Обозначения

γ' — приведенная относительная скорость g'

g' — относительная скорость частиц после неупругого столкновения

Коэффициент сдвиговой вязкости $[\eta]_1$ связан с характерным временем установления равновесного распределения по скоростям поступательного движения τ_η , определяемым в основном упругими столкновениями молекул

$$\eta = p\tau_\eta, \quad \tau_\eta = \frac{5}{8} \frac{1}{n\Omega_\eta}. \quad (5.25)$$

Комментарии

1. Для вычисления обобщенных Ω -интегралов необходимо знать выражения для неупругого сечения рассеяния $\sigma_{\alpha\beta}^{\gamma\delta}$, расчет которого различными квантово-механическими и классическими методами (например, методом классических траекторий [8–10]) выполнен лишь для немногих конкретных газов.

2. Конкретные оценки и расчеты, выполненные, в частности, для двухатомных газов, показывают, что учет неупругих столкновений слабо сказывается на значении коэффициента вязкости, поэтому в качестве приемлемой модели расчета коэффициента вязкости однокомпонентного атомарного газа можно использовать формулу (5.8), справедливую для атомарных газов.

5.2.2. Коэффициент объемной вязкости

Коэффициент объемной вязкости входит в линейное соотношение, связывающее скалярную добавку p_V к давлению p в тензоре напряжений с дивергенцией среднемассовой скорости газа \mathbf{v} :

$$p_V = -\zeta \nabla \cdot \mathbf{v}.$$

Расчетная формула

$$\zeta = \frac{1}{2} \left(\frac{c^{\text{int}}}{c_V} \right)^2 \frac{kT}{\Omega_E}; \quad \Omega_E = \left(\frac{kT}{\pi m} \right)^{1/2} \langle (\Delta\varepsilon)^2 \rangle, \quad (5.26)$$

$$c_V = c^{\text{tr}} + c^{\text{int}}; \quad c^{\text{tr}} = \frac{3}{2} \frac{k}{m}.$$

Коэффициент объемной вязкости связан с характерным временем релаксации энергии внутренних степеней свободы τ_E :

$$\zeta = \frac{2}{3} \frac{c^{\text{tr}} c^{\text{int}}}{c_V^2} p \tau_E; \quad \tau_E = \frac{3}{4} \frac{c^{\text{int}}}{c^{\text{tr}}} \frac{1}{n\Omega_E}. \quad (5.27)$$

Обозначения

c^{tr} — удельная теплоемкость, соответствующая поступательным степеням свободы молекул

c^{int} — удельная теплоемкость, соответствующая внутренним степеням свободы молекул

c_V — удельная теплоемкость газа при постоянном объеме.

Комментарий

Коэффициент объемной вязкости существенно определяется наличием внутренних степеней свободы молекул ($c^{\text{int}} \neq 0$) и их неупругими столкновениями. Расчеты вращательных и колебательных времен релаксации τ_E выполнены для ряда конкретных газов квантово-механическими и классическими методами ([6, 9], см. также введение, [2]). Экспериментальное определение этих времен связано с измерением поглощения ультразвука, либо релаксации за ударной волной в многоатомных газах, либо спектроскопическими исследованиями релаксирующего газа.

5.2.3. Коэффициент теплопроводности и фактор Эйкена

Коэффициент теплопроводности входит в линейное соотношение, имеющее тот же вид (5.12), что и в случае атомарного газа.

Расчетная формула

$$[\lambda]_1 = \lambda^{\text{tr}} + \lambda^{\text{int}} \quad (5.28)$$

$$\begin{aligned} \lambda^{\text{tr}} &= \left[\frac{5}{2} c^{\text{tr}} - \frac{5}{\pi Z} c^{\text{int}} \left(\frac{5}{2} - \beta^{\text{int}} \right) \Delta^{-1} \right] \eta, \\ \lambda^{\text{int}} &= \beta^{\text{int}} c^{\text{int}} \left[1 + \frac{2}{\pi Z} \left(\frac{5}{2} - \beta^{\text{int}} \right) \Delta^{-1} \right] \eta, \\ \Delta &= 1 + \frac{2}{\pi Z} \left(\frac{5}{2} \frac{c^{\text{int}}}{c^{\text{tr}}} + \beta^{\text{int}} \right). \end{aligned} \quad (5.29)$$

Фактор Эйкена

$$[f]_1 = \frac{[\lambda]_1}{c_V [\eta]_1} = \frac{c^{\text{tr}}}{c_V} f^{\text{tr}} + \frac{c^{\text{int}}}{c_V} f^{\text{int}}, \quad (5.30)$$

где

$$\begin{aligned} f^{\text{tr}} &= \left[\frac{5}{2} - \frac{5}{\pi} \frac{c^{\text{int}}}{c^{\text{tr}} Z} \left(\frac{5}{2} - \beta^{\text{int}} \right) \Delta^{-1} \right], \\ f^{\text{int}} &= \beta^{\text{int}} \left[1 + \frac{2}{\pi Z} \left(\frac{5}{2} - \beta^{\text{int}} \right) \Delta^{-1} \right]. \end{aligned} \quad (5.31)$$

Другая форма записи фактора f

$$f = \frac{5}{2} \frac{c^{\text{tr}}}{c_V} + \frac{c^{\text{int}}}{c_V} \beta^{\text{int}} - \frac{2}{\pi Z} \frac{c^{\text{int}}}{c_V} \Delta^{-1} \left(\frac{5}{2} - \beta^{\text{int}} \right)^2. \quad (5.32)$$

О п р е д е л е н и я

Среднее относительное число столкновений для релаксации энергии внутренних степеней свободы

$$Z = \frac{4}{\pi} \frac{\tau_E}{\tau_\eta} = \frac{24}{5\pi} \frac{c^{\text{int}}}{c^{\text{tr}}} \frac{\Omega_\eta}{\Omega_E}. \quad (5.33)$$

Безразмерный параметр, характеризующий диффузию энергии внутренних степеней свободы

$$\beta^{\text{int}} = \frac{\rho D^{\text{int}}}{\eta}; \quad \rho = mn. \quad (5.34)$$

Коэффициент диффузии внутренней энергии

$$D^{\text{int}} = \frac{3}{8} \frac{kT}{m} \frac{1}{n\Omega_D},$$

где

$$\frac{c^{\text{int}} m}{k} \Omega_D = \left(\frac{kT}{\pi m} \right)^{1/2} \langle (\varepsilon_\alpha - \langle \varepsilon \rangle) [(\varepsilon_\alpha - \varepsilon_{1\beta}) \gamma^2 - (\varepsilon_\gamma - \varepsilon_{1\delta}) \gamma \gamma' \cos \chi] \rangle. \quad (5.35)$$

Комментарий

Некоторые приближенные формулы для расчета коэффициента теплопроводности молекулярного газа с использованием линеаризации выражений (5.28)–(5.29) по параметру Z^{-1} , а также с использованием упрощенных выражений для Ω -интегралов, либо расчетных и экспериментальных значений Z и D^{int} , см. в гл. 7.

5.3. Смесь атомарных газов

Коэффициенты переноса многокомпонентной смеси атомарных газов можно выразить через Ω -интегралы, относящиеся к взаимодействию как частиц одного и того же компонента, так и частиц разных компонентов смеси. Общее выражение для Ω_{ij} -интегралов имеет вид

$$\Omega_{ij}^{(\ell,s)} = \left(\frac{kT}{2\pi \mu_{ij}} \right)^{1/2} \int_0^\infty \exp(-\gamma^2) \gamma^{2s+3} Q_{ij}^{(\ell)}(g) d\gamma, \quad (5.36)$$

$$Q_{ij}^{(\ell)}(g) = 2\pi \int [1 - \cos^\ell \chi_{ij}(b, g)] b db; \quad \gamma = \left(\frac{\mu_{ij}}{2kT} \right)^{1/2} g.$$

Приведенные Ω^* -интегралы определяются как отношение Ω -интегралов к $[\Omega]_{\text{ТВ. сф. } ij}$ -интегралам, вычисленным для модели твердых сфер диаметром σ_{ij} :

$$\begin{aligned}\Omega^{(\ell,s)*} &= \frac{\Omega^{(\ell,s)}}{[\Omega^{(\ell,s)}]_{\text{ТВ. сф. } ij}}, \\ [\Omega^{(\ell,s)}]_{\text{ТВ. сф. } ij} &= \left(\frac{kT}{2\pi\mu_{ij}} \right)^{1/2} \frac{(s+1)!}{2} \left[1 - \frac{1+(-1)^\ell}{2(\ell+1)} \right] \pi\sigma_{ij}^2, \\ \sigma_{ij} &= \frac{\sigma_{ii} + \sigma_{jj}}{2}.\end{aligned}\quad (5.37)$$

5.3.1. Коэффициент вязкости смеси

Линейное соотношение, в которое входит коэффициент вязкости смеси, имеет тот же формальный вид (5.3), что и в случае однокомпонентного газа.

Определяющие уравнения

Коэффициент вязкости смеси в ξ -м приближении по числу полиномов Сонина

$$[\eta]_\xi = \frac{1}{2} kT \sum_{i=1}^N \frac{n_i}{n} b_{i,0}(\xi). \quad (5.38)$$

Коэффициенты $b_{i,0}(\xi)$ находятся из решения системы линейных алгебраических уравнений для коэффициентов $b_{j,q}(\xi)$:

$$\sum_{j=1}^N \sum_{q=0}^{\xi-1} H_{ij}^{pq} b_{j,q}(\xi) = \frac{2}{kT} \frac{n_i}{n} \delta_{p0}; \quad i = 1, \dots, N; \quad p = 0, \dots, \xi-1. \quad (5.39)$$

Коэффициенты H_{ij}^{pq} выражаются через парциальные интегральные скобки

$$\begin{aligned}H_{ij}^{pq} &= \frac{2}{5kT} \left\{ \delta_{ij} \sum_{\ell=1}^N \frac{n_i n_\ell}{n^2} \times \right. \\ &\quad \times \left[S_{5/2}^{(p)}(W^2) \left(WW - \frac{1}{3} W^2 \delta \right); S_{5/2}^{(q)}(W^2) \left(WW - \frac{1}{3} W^2 \delta \right) \right]_{i\ell}' + \\ &\quad \left. + \frac{n_i n_j}{n^2} \left[S_{5/2}^{(p)}(W^2) \left(WW - \frac{1}{3} W^2 \delta \right); S_{5/2}^{(q)}(W^2) \left(WW - \frac{1}{3} W^2 \delta \right) \right]_{ij}'' \right\}_{il}, \\ H_{ij}^{pq} &= H_{ij}^{qp}. \end{aligned} \quad (5.40)$$

Парциальные интегральные скобки записываются в виде линейных комбинаций Ω -интегралов. Конкретные выражения для парциальных скобок приведены в разд. 5.5.

Первое приближение ($\xi = 1$)

Коэффициенты $b_{i,0}(1)$ находятся из решения системы уравнений

$$\sum_{j=1}^N H_{ij}^{00} b_{j,0}(1) = \frac{2}{kT} \frac{n_i}{n}; \quad i = 1, \dots, N. \quad (5.41)$$

Расчетная формула

$$[\eta]_1 = -\frac{1}{|H^{00}|} \begin{vmatrix} H_{11}^{00} & \dots & H_{1N}^{00} & x_1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ H_{N1}^{00} & \dots & H_{NN}^{00} & x_N \\ x_1 & \dots & x_N & 0 \end{vmatrix}. \quad (5.42)$$

Коэффициенты H^{00}

$$H_{ii}^{00} = \frac{x_i^2}{[\eta_{ii}]_1} + \sum_{\ell \neq i}^N \frac{2x_i x_\ell}{[\eta_{i\ell}]_1} \frac{m_i m_\ell}{(m_i + m_\ell)^2} \left(\frac{5}{3A_{i\ell}^*} + \frac{m_\ell}{m_i} \right), \quad (5.43)$$

$$H_{ij}^{00} = -\frac{2x_i x_j}{[\eta_{ij}]_1} \frac{m_i m_j}{(m_i + m_j)^2} \left(\frac{5}{3A_{ij}^*} - 1 \right); \quad j \neq i.$$

Коэффициент вязкости однокомпонентного газа частиц компонента i , определяемый в первом приближении

$$[\eta_{ii}]_1 = \frac{5}{16} \frac{(\pi m_i kT)^{1/2}}{\pi \sigma_{ii}^2 \Omega_{ii}^{(2,2)*}}. \quad (5.44)$$

Параметр, характеризующий взаимодействие частиц компонентов i и j и вводимый по аналогии с определением коэффициента вязкости однокомпонентного газа

$$[\eta_{ij}]_1 = \frac{5}{16} \frac{(2\pi \mu_{ij} kT)^{1/2}}{\pi \sigma_{ij}^2 \Omega_{ij}^{(2,2)*}}. \quad (5.45)$$

Отношение Ω -интегралов

$$A_{ij}^* = \frac{\Omega_{ij}^{(2,2)}}{2\Omega_{ij}^{(1,1)}} = \frac{\Omega_{ij}^{(2,2)*}}{\Omega_{ij}^{(1,1)*}}. \quad (5.46)$$

Приведенная масса частиц компонентов i и j

$$\mu_{ij} = \frac{m_i m_j}{(m_i + m_j)}. \quad (5.47)$$

Комментарии

1. Выражение (5.42) для коэффициента вязкости смеси получается при решении системы уравнений (5.41) по правилу Крамера. Полученные выражения для $b_{i,0}^{(1)}$ подставляются в (5.38). При этом знаменатель

формулы (5.42), обозначаемый как $|H^{00}|$, представляет собой определитель системы уравнений (5.39) — детерминант порядка N :

$$|H^{00}| = \begin{vmatrix} H_{11}^{00} & \dots & H_{1N}^{00} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{N1}^{00} & \dots & H_{NN}^{00} \end{vmatrix}. \quad (5.48)$$

2. При $N = 1$ формула (5.42) переходит в выражение (5.7) для коэффициента вязкости однокомпонентного атомарного газа.

3. Коэффициент вязкости смеси нейтральных компонентов, полученный с использованием модели твердых сфер, во втором приближении ($\xi = 2$) отличается от его значения в первом приближении не более чем на 0,1 %. Вклад в коэффициент вязкости следующих приближений оказывается более существенным в случае ионизованных газов (см. гл. 12).

4. Величина $[\eta_{ij}]_1$ непосредственно связана с коэффициентом бинарной диффузии $[D_{ij}]_1$ частиц компонентов i и j , определяемым в первом приближении (см. ниже)

$$[\eta_{ij}]_1 = \frac{5}{3} \mu_{ij} \frac{n[D_{ij}]_1}{A_{ij}^*}. \quad (5.49)$$

5.3.2. Коэффициент вязкости бинарной смеси

Коэффициент вязкости бинарной смеси газов в первом приближении

Расчетная формула

$$[\eta]_1 = \frac{1 + Z_\eta}{X_\eta + Y_\eta}, \quad (5.50)$$

$$\begin{aligned} X_\eta &= \frac{x_1^2}{[\eta_{11}]_1} + \frac{2x_1 x_2}{[\eta_{12}]_1} + \frac{x_2^2}{[\eta_{22}]_1}, \\ Y_\eta &= \frac{3}{5} A_{12}^* \left\{ \frac{x_1^2}{[\eta_{11}]_1} \frac{\widetilde{M}_1}{\widetilde{M}_2} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{2x_1 x_2}{[\eta_{12}]_1} \frac{(\widetilde{M}_1 + \widetilde{M}_2)^2}{4\widetilde{M}_1 \widetilde{M}_2} \left(\frac{[\eta_{12}]_1^2}{[\eta_{11}]_1 [\eta_{22}]_1} \right) + \frac{x_2^2}{[\eta_{22}]_1} \frac{\widetilde{M}_2}{\widetilde{M}_1} \right\}, \\ Z_\eta &= \frac{3}{5} A_{12}^* \left\{ x_1^2 \frac{\widetilde{M}_1}{\widetilde{M}_2} + \right. \\ &\quad \left. + 2x_1 x_2 \left[\frac{(\widetilde{M}_1 + \widetilde{M}_2)^2}{4\widetilde{M}_1 \widetilde{M}_2} \left(\frac{[\eta_{12}]_1}{[\eta_{11}]_1} + \frac{[\eta_{12}]_1}{[\eta_{22}]_1} \right) - 1 \right] + x_2^2 \frac{\widetilde{M}_2}{\widetilde{M}_1} \right\}. \end{aligned} \quad (5.51)$$

Комментарий

Коэффициенты вязкости компонентов $[\eta_{ii}]_1$, параметры $[\eta_{ij}]_1$ и A_{ij}^* определены выражениями (5.44)–(5.47).

5.3.3. Коэффициент теплопроводности смеси

Истинный коэффициент теплопроводности смеси λ входит в выражение (4.29) для вектора плотности теплового потока

$$\mathbf{q} = -\lambda \nabla T + p \sum_i \left(k_{Ti} + \frac{5}{2} x_i \right) \mathbf{V}_i. \quad (5.52)$$

Определяющие уравнения

Коэффициент теплопроводности в ξ -м приближении по числу полиномов Сонина в разложении равен

$$[\lambda]_\xi = \frac{5}{4} k \sum_{i=1}^N \frac{n_i}{n} \tilde{a}_{i,1}(\xi). \quad (5.53)$$

Решение системы алгебраических уравнений для коэффициентов $\tilde{a}_{j,q}(\xi)$ дает выражение:

$$\sum_{j=1}^N \sum_{q=1}^{\xi} \Lambda_{ij}^{pq} \tilde{a}_{j,q}(\xi) = \frac{4}{5k} \frac{n_i}{n} \delta_{p1}; \quad i = 1, \dots, N; \quad p = 1, \dots, \xi. \quad (5.54)$$

Коэффициенты Λ_{ij}^{pq} выражаются через парциальные интегральные скобки:

$$\Lambda_{ij}^{pq} = \frac{8m_i^{1/2} m_j^{1/2}}{75k^2 T} \left\{ \delta_{ij} \sum_{\ell=1}^N \frac{n_i n_\ell}{n^2} [S_{3/2}^{(p)}(W_{ij}^2) W_{ij}; S_{3/2}^{(q)}(W_{ij}^2) W_{ij}]'_{i\ell} + \right. \\ \left. + \frac{n_i n_j}{n^2} [S_{3/2}^{(p)}(W_{ij}^2) W_{ij}; S_{3/2}^{(q)}(W_{ij}^2) W_{ij}]''_{ij} \right\}. \quad (5.55)$$

Первое приближение ($\xi = 1$)

Коэффициенты $\tilde{a}_{i,1}(1)$ являются решением системы уравнений

$$\sum_{j=1}^N \Lambda_{ij}^{11} \tilde{a}_{j,1}(1) = \frac{4}{5k} \frac{n_i}{n}; \quad i = 1, \dots, N. \quad (5.56)$$

Истинный коэффициент теплопроводности смеси

Расчетные формулы

$$\lambda = -\frac{1}{|\Lambda^{11}|} \begin{vmatrix} \Lambda_{11}^{11} & \dots & \Lambda_{1N}^{11} & x_1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \Lambda_{N1}^{11} & \dots & \Lambda_{NN}^{11} & x_N \\ x_1 & \dots & x_N & 0 \end{vmatrix}. \quad (5.57)$$

Коэффициенты Λ_{ij}^{11}

$$\begin{aligned}\Lambda_{ii}^{11} &= \frac{x_i^2}{[\lambda_{ii}]_1} + \sum_{j \neq i} \frac{x_i x_j}{2A_{ij}^*(m_i + m_j)[\lambda_{ij}]_1} \times \\ &\quad \times \left(\frac{15}{2} m_i^2 + \frac{25}{4} m_j^2 - 3m_j^2 B_{ij}^* + 4m_i m_j A_{ij}^* \right), \\ \Lambda_{ij}^{11} &= -\frac{m_i m_j}{(m_i + m_j)^2} \frac{x_i x_j}{2A_{ij}^*[\lambda_{ij}]_1} \left(\frac{55}{4} - 3B_{ij}^* - 4A_{ij}^* \right); \quad j \neq i. \quad (5.58)\end{aligned}$$

Определения

Коэффициент теплопроводности однокомпонентного газа частиц компонента i , определяемый в первом приближении

$$[\lambda_{ii}]_1 = \frac{15}{4} \frac{k}{m_i} [\eta_{ii}]_1 = \frac{75}{64} k \frac{(\pi k T / m_i)^{1/2}}{\pi \sigma_{ii}^2 \Omega_{ii}^{(2,2)*}}. \quad (5.59)$$

Параметр, характеризующий взаимодействие частиц компонентов i и j

$$[\lambda_{ij}]_1 = \frac{15}{4} \frac{k}{2\mu_{ij}} [\eta_{ij}]_1 = \frac{75}{64} k \frac{(\pi k T / 2\mu_{ij})^{1/2}}{\pi \sigma_{ij}^2 \Omega_{ij}^{(2,2)*}}. \quad (5.60)$$

Отношения Ω -интегралов

$$A_{ij}^* = \frac{\Omega_{ij}^{(2,2)*}}{\Omega_{ij}^{(1,1)*}}, \quad B_{ij}^* = \frac{5\Omega_{ij}^{(2,2)*} - 4\Omega_{ij}^{(1,3)*}}{\Omega_{ij}^{(1,1)*}}. \quad (5.61)$$

Комментарии

1. Параметр $[\lambda_{ij}]_1$ вводится по аналогии с определением коэффициента теплопроводности однокомпонентного атомарного газа.

2. При $N = 1$ выражение (5.57) переходит в выражение для коэффициента теплопроводности однокомпонентного атомарного газа.

5.3.4. Истинный коэффициент теплопроводности бинарной смеси

Коэффициент теплопроводности в первом приближении

Расчетные формулы

$$[\lambda]_1 = \frac{1 + Z_\lambda}{X_\lambda + Y_\lambda}, \quad (5.62)$$

$$\begin{aligned}X_\lambda &= \frac{x_1^2}{[\lambda_{11}]_1} + \frac{2x_1 x_2}{[\lambda_{12}]_1} + \frac{x_2^2}{[\lambda_{22}]_1}, \\ Y_\lambda &= \frac{x_1^2}{[\lambda_{11}]_1} U^{(1)} + \frac{2x_1 x_2}{[\lambda_{12}]_1} U^{(Y)} + \frac{x_2^2}{[\lambda_{22}]_1} U^{(2)}, \\ Z_\lambda &= x_1^2 U^{(1)} + 2x_1 x_2 U^{(Z)} + x_2^2 U^{(2)},\end{aligned} \quad (5.63)$$

где

$$\begin{aligned}
 U^{(1)} &= \frac{4}{15} A_{12}^* - \frac{1}{12} \left(\frac{12}{5} B_{12}^* + 1 \right) \frac{m_1}{m_2} + \frac{1}{2} \frac{(m_1 - m_2)^2}{m_1 m_2}, \\
 U^{(2)} &= \frac{4}{15} A_{12}^* - \frac{1}{12} \left(\frac{12}{5} B_{12}^* + 1 \right) \frac{m_2}{m_1} + \frac{1}{2} \frac{(m_2 - m_1)^2}{m_1 m_2}, \\
 U^{(Y)} &= \frac{4}{15} A_{12}^* \frac{(m_1 + m_2)^2}{4m_1 m_2} \frac{[\lambda_{12}]_1^2}{[\lambda_{11}]_1 [\lambda_{22}]_1} - \frac{1}{12} \left(\frac{12}{5} B_{12}^* + 1 \right) - \\
 &\quad - \frac{5}{32 A_{12}^*} \left(\frac{12}{5} B_{12}^* - 5 \right) \frac{(m_1 - m_2)^2}{m_1 m_2}, \quad (5.64) \\
 U^{(Z)} &= \frac{4}{15} A_{12}^* \left[\frac{(m_1 + m_2)^2}{4m_1 m_2} \left(\frac{[\lambda_{12}]_1}{[\lambda_{11}]_1} + \frac{[\lambda_{12}]_1}{[\lambda_{22}]_1} - 1 \right) \right] - \\
 &\quad - \frac{1}{12} \left(\frac{12}{5} B_{12}^* + 1 \right).
 \end{aligned}$$

5.3.5. Коэффициент диффузии бинарной смеси

Коэффициент диффузии бинарной смеси в первом приближении
($\xi = 1$)

Коэффициент диффузии $[\mathcal{D}_{ij}]_1$ входит в качестве коэффициента в соотношение Стефана–Максвелла для диффузионных скоростей компонентов смеси (4.32):

$$\sum_j \alpha_{ij} (\mathbf{V}_i - \mathbf{V}_j) + k_{Ti} \frac{1}{T} \nabla T = -\mathbf{d}_i, \quad (5.65)$$

$$\alpha_{ij} = \frac{x_i x_j}{[\mathcal{D}_{ij}]_1} (1 - \Delta_{ij}). \quad (5.66)$$

Расчетные формулы

$$[\mathcal{D}_{ij}]_1 = \frac{3kT}{16n\mu_{ij} \Omega_{ij}^{(1,1)}} \quad (5.67)$$

или

$$[\mathcal{D}_{ij}]_1 = \frac{3}{16n} \left[\frac{2\pi k(m_i + m_j)T}{m_i m_j} \right]^{1/2} \frac{1}{\pi \sigma_{ij}^2 \Omega_{ij}^{(1,1)*}}. \quad (5.68)$$

5.3.6. Термодиффузионные отношения k_{Ti}

Термодиффузионные отношения k_{Ti} входят в коэффициенты перед градиентом температуры в соотношении Стефана–Максвелла (5.65) и в виде множителя перед диффузионными скоростями \mathbf{V}_i в выражении для вектора плотности теплового потока (5.52).

Определяющие уравнения

Термодиффузионные отношения k_{Ti} в ξ -м приближении по числу полиномов Сонина

$$[k_{Ti}]_{\xi} = \frac{5}{4n} \sum_{j=1}^N x_j \tilde{d}_{j,1}^i(\xi). \quad (5.69)$$

Коэффициенты $\tilde{d}_{i,1}^i(\xi)$ находятся из решения системы алгебраических уравнений для коэффициентов $\tilde{d}_{j,q}^i(\xi)$:

$$\sum_{j=1}^N \sum_{q=1}^{\xi} \Lambda_{ij}^{pq} \tilde{d}_{j,q}^i(\xi) = 2n \Lambda_{i\ell}^{p0}, \quad i = 1, \dots, N; \quad p = 1, \dots, \xi. \quad (5.70)$$

Расчетные формулы

Первое приближение ($\xi = 1$)

$$[k_{Ti}]_1 = -\frac{5}{2} \frac{1}{|\Lambda^{11}|} = \begin{vmatrix} 0 & x_1 & x_2 & \dots & x_N \\ \Lambda_{1i}^{10} & \Lambda_{11}^{11} & \Lambda_{12}^{11} & \dots & \Lambda_{1N}^{11} \\ \Lambda_{2i}^{10} & \Lambda_{21}^{11} & \Lambda_{22}^{11} & \dots & \Lambda_{2N}^{11} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \Lambda_{Ni}^{10} & \Lambda_{N1}^{11} & \Lambda_{N2}^{11} & \dots & \Lambda_{NN}^{11} \end{vmatrix}. \quad (5.71)$$

Коэффициенты $\Lambda_{ij}^{10} = \Lambda_{ij}^{01}$ и

$$\Lambda_{ii}^{01} = \Lambda_{ii}^{10} = \frac{5}{4} \sum_{\ell \neq i} \frac{x_i x_{\ell}}{A_{i\ell}^* [\lambda_{i\ell}]_1} \frac{m_{\ell}}{m_i + m_{\ell}} \left(\frac{6}{5} C_{i\ell}^* - 1 \right), \quad (5.72)$$

$$\Lambda_{ij}^{01} = -\frac{5}{4} \frac{x_i x_j}{A_{ij}^* [\lambda_{ij}]_1} \frac{m_i}{m_i + m_j} \left(\frac{6}{5} C_{ij}^* - 1 \right),$$

где

$$C_{ij}^* = \frac{\Omega_{ij}^{(1,2)*}}{\Omega_{ij}^{(1,1)*}}. \quad (5.73)$$

Коэффициенты Λ_{ii}^{11} и Λ_{ij}^{11} представлены в выражениях (5.58).

5.3.7. Поправочные коэффициенты Δ_{ij} к коэффициентам диффузии в соотношениях Стефана–Максвелла

Поправочные коэффициенты Δ_{ij} вводятся в выражениях для коэффициентов диффузионных сопротивлений α_{ij} в соотношениях Стефана–Максвелла (5.65).

Определяющее уравнение

Поправочный коэффициент в первом исчезающем приближении

$$\Delta_{ij} = \frac{25}{8} \frac{k[D_{ij}]_1}{x_i x_j} \sum_{h=1}^N \sum_{p=1}^{\xi} \tilde{d}_{h,p}^i(\xi) \Lambda_{ih}^{0p}. \quad (5.74)$$

Коэффициенты $\tilde{d}_{i,1}^j(\xi)$ находятся из решения системы алгебраических уравнений (5.70).

Расчетная формула

Поправочный коэффициент в первом исчезающем приближении

$$\Delta_{ij} = \frac{25nk[\mathcal{D}_{ij}]_1}{4x_i x_j} \frac{1}{|\Lambda^{11}|} = \begin{vmatrix} 0 & \Lambda_{j1}^{01} & \Lambda_{j2}^{01} & \dots & \Lambda_{jN}^{01} \\ \Lambda_{1i}^{10} & \Lambda_{11}^{11} & \Lambda_{12}^{11} & \dots & \Lambda_{1N}^{11} \\ \Lambda_{2i}^{10} & \Lambda_{21}^{11} & \Lambda_{22}^{11} & \dots & \Lambda_{2N}^{11} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \Lambda_{Ni}^{10} & \Lambda_{N1}^{11} & \Lambda_{N2}^{11} & \dots & \Lambda_{NN}^{11} \end{vmatrix}. \quad (5.75)$$

5.3.8. Коэффициенты диффузии и термодиффузии многокомпонентной смеси

Коэффициенты D_{ij} и D_{Ti} входят в виде коэффициентов пропорциональности в выражение для массового диффузионного потока \mathbf{J}_i :

$$\mathbf{J}_i = -\rho \left(\sum_j D_{ij} \mathbf{d}_j + D_{Ti} \frac{1}{T} \nabla T \right) \quad (5.76)$$

или

$$\mathbf{J}_i = -\rho \sum D_{ij} \left(\mathbf{d}_j + k_{Tj} \frac{1}{T} \nabla T \right); \quad i, j = 1, \dots, N. \quad (5.77)$$

Значения D_{ij} определяются из решения систем уравнений

$$\sum_j \frac{x_i x_j}{[\mathcal{D}_{ij}]_1} (1 - \Delta_{ij})(D_{ik} - D_{jk}) = \delta_{ik} - \frac{\rho_i}{\rho}, \quad (5.78)$$

$$\sum_i \rho_i D_{ik} = 0$$

или из эквивалентной им одной системы уравнений

$$\sum_{j \neq i} \left[\frac{x_i x_j}{[\mathcal{D}_{ij}]_1} (1 - \Delta_{ij}) + \sum_{\ell \neq i} \frac{x_\ell x_j m_j}{m_i [\mathcal{D}_{i\ell}]_1} (1 - \Delta_{i\ell}) \right] D_{jk} = \frac{\rho_i}{\rho} - \delta_{ik}. \quad (5.79)$$

Комментарии

1. Системы уравнений (5.78) или (5.79) следуют из соотношений Стефана–Максвелла (5.65) (при $k_{Ti} = 0$) и условия $\sum_i \rho_i \mathbf{V}_i = 0$.

2. В традиционной схеме метода Чепмена–Энскога коэффициенты D_{ij} и D_{Ti} выражаются через коэффициенты разложения $\tilde{d}_{i,0}^j(\xi)$ и $a_{i,0}(\xi)$, которые, в свою очередь, определяются из решения систем уравнений (4.65). Получаемые при этом выражения для рассматриваемых кинетических коэффициентов даже в первом (неисходящем) приближении выражаются в форме отношений определителей порядка

$2N + 1$ к определителю порядка $2N$ по сравнению с полученными выше выражениями, записанными в форме отношения определителей порядка $N + 1$ и N . По этой причине использование уравнений (5.79) для перехода к выражениям (5.76) или (5.77) представляется предпочтительным способом получения необходимых результатов.

3. Переход от уравнения (5.76) к (5.77) оказывается возможным в связи с введением термодиффузионных отношений k_{Ti} с помощью соотношения

$$\sum_j D_{ij} k_{Tj} = D_{Ti}. \quad (5.80)$$

Поскольку величина k_{Ti} уже определена выражением (5.69) и решением уравнений (5.70), для нахождения D_{Ti} достаточно знания выражений для коэффициентов D_{ij} , получаемых из решения уравнений (5.79).

5.3.9. Коэффициенты диффузии и термодиффузии бинарной газовой смеси

Коэффициент взаимной диффузии

Для бинарной смеси газов величина $[\mathcal{D}_{12}]_1$ входит в коэффициент пропорциональности между массовым диффузионным потоком \mathbf{J}_1 и диффузионной термодинамической силой \mathbf{d}_1 :

$$\mathbf{J}_1 = -\mathbf{J}_2 = -\left(\frac{n^2}{\rho}\right) m_1 m_2 [\mathcal{D}_{12}]_1 \mathbf{d}_1. \quad (5.81)$$

Расчетные формулы

Коэффициент взаимной диффузии в первом приближении

$$[\mathcal{D}_{12}]_1 = \frac{3kT}{16n\mu_{12}\Omega_{12}^{(1,1)}}. \quad (5.82)$$

Представление через Ω^* -интегралы

$$[\mathcal{D}_{12}]_1 = \frac{3}{16n} \left[\frac{2\pi k(m_1 + m_2)T}{m_1 m_2} \right]^{1/2} \frac{1}{\pi\sigma_{12}^2 \Omega_{12}^{(1,1)*}}. \quad (5.83)$$

Коэффициент взаимной диффузии во втором приближении

$$[\mathcal{D}_{12}]_2 = [\mathcal{D}_{12}]_1 f_D^{(2)}, \quad f_D^{(2)} = (1 - \Delta_{12})^{-1}. \quad (5.84)$$

Поправка второго приближения

$$\Delta_{12} = \frac{(6C_{12}^* - 5)^2}{60} \cdot \frac{W}{X_\lambda + Y_\lambda},$$

$$W = \frac{x_1^2}{[\lambda_{11}]_1} \left(\frac{m_1}{m_2} \right) + \frac{2x_1 x_2}{[\lambda_{12}]_1} \left[1 + \frac{15}{8A_{12}^*} \cdot \frac{(m_1 - m_2)^2}{m_1 m_2} \right] + \frac{x_2^2}{[\lambda_{22}]_1} \left(\frac{m_2}{m_1} \right). \quad (5.85)$$

Выражения для X_λ и Y_λ представлены в формулах (5.63).

Коэффициент самодиффузии

Расчетные формулы

Коэффициент самодиффузии в первом приближении

$$[\mathcal{D}_{11}]_1 = \frac{3}{8n} \left(\frac{\pi kT}{m} \right)^{1/2} \frac{1}{\pi \sigma^2 \Omega_{11}^{(1,1)*}}. \quad (5.86)$$

Коэффициент самодиффузии во втором приближении

$$[\mathcal{D}_{11}]_2 = \frac{[\mathcal{D}_{11}]_1}{1 - \Delta}, \quad \Delta = \frac{(6C^* - 5)^2}{55 - 12B^* + 32A^*}. \quad (5.87)$$

Обозначения

 σ — диаметр молекулы A^*, B^*, C^* — безразмерные комбинации Ω -интегралов

Комментарий

Коэффициент самодиффузии — это коэффициент диффузии молекул в собственном газе. При этом $m_1 = m_2 = m$ и все сечения взаимодействия считаются одинаковыми.

Коэффициент термодиффузии и термодиффузионное отношение

Расчетные формулы

Коэффициент термодиффузии

$$[\mathcal{D}_T]_2 = [\mathcal{D}_{12}]_1 [k_T]_2. \quad (5.88)$$

Термодиффузионное отношение бинарной смеси

$$\begin{aligned} [k_T]_2 &= \frac{1}{6[\lambda_{12}]_2} \frac{S^{(1)} x_1 - S^{(2)} x_2}{X_\lambda + Y_\lambda} (6C_{12}^* - 5), \\ S^{(1)} &= \frac{m_1 + m_2}{2m_2} \frac{[\lambda_{12}]_1}{[\lambda_{11}]_1} - \frac{15}{4A_{12}^*} \frac{m_2 - m_1}{2m_1} - 1, \\ S^{(2)} &= \frac{m_2 + m_1}{2m_1} \frac{[\lambda_{12}]_1}{[\lambda_{22}]_1} - \frac{15}{4A_{12}^*} \frac{m_1 - m_2}{2m_2} - 1. \end{aligned} \quad (5.89)$$

Выражения для X_λ и Y_λ представлены в формулах (5.63).*Термодиффузионный фактор*

$$\alpha_T = k_T / x_1 x_2. \quad (5.90)$$

5.4. Смесь молекулярных газов

Коэффициенты переноса смеси молекулярных газов можно выразить через обобщенные Ω -интегралы, относящиеся к взаимодействию как частиц одного и того же компонента, так и частиц разных компонентов смеси. Для взаимодействия частиц компонентов i и j

соответствующее интегральное выражение имеет вид

$$\begin{aligned}\Omega_{ij} &= \left(\frac{kT}{2\pi\mu_{ij}} \right)^{1/2} \langle F \rangle_{ij} = \\ &= \left(\frac{kT}{2\pi\mu_{ij}} \right)^{1/2} (Q_i^{\text{in}} Q_j^{\text{in}})^{-1} \sum_{\alpha\beta\kappa\delta} \int_0^\pi \sin \chi \, d\chi \int_0^{2\pi} d\varphi \times \\ &\quad \times \int_0^\infty F \gamma^3 \exp(-\gamma^2 - \varepsilon_{i\alpha} - \varepsilon_{1j\beta}) \sigma_{\alpha\beta}^{\kappa\delta}(\gamma, \chi, \varphi) \, d\gamma. \quad (5.91)\end{aligned}$$

Приводимые ниже формальные выражения для коэффициентов переноса смеси молекулярных газов соответствуют по точности расчета первому неисчезающему приближению в разложении по полиномам Сонина и Вальдмана–Трубенбахера.

5.4.1. Коэффициент вязкости смеси

Выражение для коэффициента вязкости смеси молекулярных газов, вычисленного в первом приближении, имеет тот же формальный вид, что и выражение (5.42) для смеси атомарных газов. Элементы определителей записываются в виде

$$\begin{aligned}H_{ii}^{00} &= \frac{x_i^2}{[\eta_{ii}]_1} + \sum_{\ell \neq i} \frac{2x_i x_\ell}{(m_i + m_\ell) n[\mathcal{D}_{i\ell}]_1} \left(1 + \frac{3}{5} \frac{m_\ell}{m_i} A_{i\ell}^* \right), \\ H_{ij}^{00} &= - \frac{2x_i x_j}{(m_i + m_j) n[\mathcal{D}_{ij}]_1} \left(1 - \frac{3}{5} A_{ij}^* \right); \quad j \neq i.\end{aligned} \quad (5.92)$$

Коэффициенты переноса

Коэффициент вязкости газа из частиц компонента i

$$[\eta_{ii}]_1 = \frac{5}{8} \frac{kT}{\Omega_{ii}^{(2,2)}}, \quad (5.93)$$

где $\Omega_{ii}^{(2,2)} = \left(\frac{kT}{\pi m_i} \right)^{1/2} \left\langle \gamma^2 (\gamma^2 - \gamma'^2 \cos^2 \chi) - \frac{1}{6} (\Delta \varepsilon_{\alpha\alpha})^2 \right\rangle.$

Коэффициент бинарной диффузии частиц компонентов i и j

$$[\mathcal{D}_{ij}]_1 = \frac{3kT}{16n\mu_{ij} \Omega_{ij}^{(1,1)}}, \quad (5.94)$$

где $\Omega_{ij}^{(1,1)} = \left(\frac{kT}{2\pi\mu_{ij}} \right)^{1/2} \langle \gamma^2 - \gamma\gamma' \cos \chi \rangle_{ij}.$

Отношение Ω -интегралов для молекул компонентов i и j

$$A_{ij}^* = \frac{\Omega_{ij}^{(2,2)}}{2\Omega_{ij}^{(1,1)}} = \frac{\left\langle \gamma^2(\gamma^2 - \gamma'^2 \cos^2 \chi) - \frac{1}{6} (\Delta \varepsilon_{\alpha\beta})^2 \right\rangle_{ij}}{2\langle \gamma^2 - \gamma\gamma' \cos \chi \rangle_{ij}}. \quad (5.95)$$

Комментарий

Как и в случае однокомпонентного молекулярного газа, влияние неупругих столкновений на вязкость смеси оказывается малым. Точность расчета повышается, если вместо расчетных значений вязкостей чистых компонентов и коэффициента бинарной диффузии использовать их экспериментальные значения. При этом коэффициент A_{ij}^* принимается равным его значению, вычисляемому так же, как для смеси атомарных газов.

5.4.2. Истинный коэффициент теплопроводности смеси

Формальное выражение для истинного коэффициента теплопроводности смеси молекулярных газов даже в первом приближении имеет сложную структуру и записывается в виде отношения определителей порядка $2N + 1$ к определителю порядка $2N$. По сравнению с рассмотрением смеси атомарных газов существенно усложняются также выражения для элементов определителей, в которых учитывается вклад неупругих столкновений. По этой причине ниже приводятся упрощенные выражения, в которых учитываются основные члены. Выражения для остающихся малых поправок можно найти в литературе [11–13].

Расчетные формулы

$$\lambda = \lambda^{\text{tr}} + \lambda^{\text{int}}. \quad (5.96)$$

Поступательная часть коэффициента теплопроводности рассчитывается по формулам для смеси атомарных газов (5.57) с элементами определителей в форме (5.58) с использованием соотношений

$$\begin{aligned} [\lambda_{ii}]_1 &= \frac{15}{4} \frac{k}{m_i} [\eta_{ii}]_1, \\ [\lambda_{ij}]_1 &= \frac{15}{4} \frac{k}{2\mu_{ij}} [\eta_{ij}]_1 = \frac{75}{64} k \frac{n[D_{ij}]_1}{A_{ij}^*}. \end{aligned} \quad (5.97)$$

Составляющая коэффициента теплопроводности, связанная с внутренними степенями свободы молекул, равна

$$\lambda^{\text{int}} = \sum_{i=1}^N \lambda_{ii}^{\text{int}} \left[1 + \sum_{j \neq i}^N \left(\frac{x_j}{x_i} \right) \frac{D_{ii}^{\text{int}}}{D_{ij}^{\text{int}}} \right]^{-1}. \quad (5.98)$$

Обозначение

c_i^{int} — теплоемкость, связанная с внутренними степенями свободы молекул компонента i .

Коэффициенты переноса

Истинный коэффициент теплопроводности компонента i , связанный с внутренними степенями свободы

$$\lambda_{ii}^{\text{int}} = c_i^{\text{int}} n D_{ii}^{\text{int}}. \quad (5.99)$$

Коэффициент диффузии внутренней энергии компонента i

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{ii}^{\text{int}} &= \frac{3kT}{8nm_i \Omega_{ii}^{\text{int}}}, \\ \frac{c_i^{\text{int}} m_i}{k} \Omega_{ii}^{\text{int}} &= \left(\frac{3kT}{8nm_i \Omega_{ii}^{\text{int}}} \right) \langle (\varepsilon_{i\alpha} - \langle \varepsilon_i \rangle) [(\varepsilon_{i\alpha} - \varepsilon_{i\beta}) \gamma^2 - \\ &\quad (\varepsilon_{i\kappa} - \varepsilon_{i\delta}) - \gamma \gamma' \cos \chi] \rangle_{ii}. \end{aligned} \quad (5.100)$$

Коэффициент диффузии внутренней энергии компонентов i и j

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{ij}^{\text{int}} &= \frac{3kT}{16n\mu_{ij} \Omega_{ij}^{\text{int}}}, \\ \frac{c_i^{\text{int}} m_i}{k} \Omega_{ij}^{\text{int}} &= \left(\frac{kT}{16n\mu_{ij} \Omega_{ij}^{\text{int}}} \right) \langle (\varepsilon_{i\alpha} - \langle \varepsilon_i \rangle) [(\varepsilon_{i\alpha} - \langle \varepsilon_i \rangle) \gamma^2 - \\ &\quad - (\varepsilon_{i\kappa} - \langle \varepsilon_i \rangle) \gamma \gamma' \cos \chi] \rangle_{ij}. \end{aligned} \quad (5.101)$$

Комментарий

Расчет коэффициентов D_{ii}^{int} и D_{ij}^{int} по формулам (5.98) и (5.99) возможен только при известных потенциалах неупругого взаимодействия молекул смеси между собой. На практике при расчете значения λ^{tr} в качестве $[\eta_{ii}]_1$ и $[D_{ij}]_1$ могут использоваться истинные значения коэффициентов вязкости отдельных компонентов смеси η_{ii} и коэффициентов бинарной диффузии пар молекул D_{ij} . Для расчета λ^{int} вместо значений D_{ii}^{int} и D_{ij}^{int} можно приближенно использовать истинные значения коэффициентов D_{ii} и D_{ij} (формула Гиршфельдера).

5.4.3. Коэффициент теплопроводности смеси химически реагирующих возбужденных газов

Назначение

Вычисление истинного коэффициента теплопроводности смеси химически реагирующих возбужденных газов.

Расчетные формулы

$$\lambda = \lambda^{\text{tr}} + \lambda^{\text{int}} + \lambda^R + \lambda_e, \quad (5.102)$$

$$\lambda^{\text{int}} = \lambda^{\text{rot}} + \lambda^{\text{vib}} + \lambda^{\text{el}}, \quad (5.103)$$

$$\lambda^R = \lambda^{\text{ch}} + \lambda^D + \lambda^I. \quad (5.104)$$

Комментарии

1. Коэффициент теплопроводности химически реагирующих возбужденных газов является суммой коэффициентов поступательной теплопроводности, теплопроводности, связанной с внутренними степенями свободы, теплопроводности, обусловленной переносом энергии в хими-

ческих реакциях, реакциях диссоциации и ионизации, а также коэффициента теплопроводности электронного газа.

Коэффициент теплопроводности, связанной с внутренними степенями свободы, складывается из коэффициентов теплопроводности, обусловленных переносом внутренней энергии, запасенной на вращательных, колебательных и электронных уровнях молекул.

2. Коэффициент поступательной теплопроводности определен формулой (5.97).

3. Коэффициент теплопроводности, связанной с внутренними степенями свободы, определен формулой (5.99) (см. разд. 5.4.2).

4. Вклад в коэффициент теплопроводности, обусловленный переносом тепла за счет химических реакций, реакций ионизации и диссоциации, определяется поправкой Брокау [14, 15].

5. Коэффициент теплопроводности, обусловленный переносом энергии свободными электронами, дается формулой (12.2), где подробно рассмотрены различные выражения для нее в слабоионизованном и полностью ионизованном газе.

6. Коэффициент теплопроводности, обусловленный переносом энергии в химических реакциях, реакциях диссоциации и ионизации, при подробном рассмотрении разбивается на соответствующие вклады [16–18].

Обозначения

λ^R — коэффициент теплопроводности, обусловленный химическими реакциями, диссоциацией и ионизацией (поправки Брокау)

λ^D — коэффициент диссоционной теплопроводности

λ^I — коэффициент ионизационной теплопроводности

Определение

Коэффициент теплопроводности λ^R (поправка Брокау)

$$\lambda^R = -\frac{1}{RT^2} \begin{vmatrix} 0 & \Delta H_1 & \dots & \Delta H_\alpha \\ \Delta H_1 & A_{11} & \dots & A_{1\alpha} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \Delta H_\alpha & A_{\alpha 1} & \dots & A_{\alpha\alpha} \end{vmatrix} : \begin{vmatrix} A_{11} & \dots & A_{1\alpha} \\ \dots & \dots & \dots \\ A_{\alpha 1} & \dots & A_{\alpha\alpha} \end{vmatrix}, \quad (5.105)$$

где α — число одновременно протекающих химических реакций; ΔH_r — теплота r -й реакции. Матричный элемент $A_{rs} = A_{sr} =$

$$= \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N (RT/D_{ij}p) x_i x_j [(\xi_{ri}/x_i) - (\xi_{rj}/x_j)] [(\xi_{si}/x_i) - (\xi_{sj}/x_j)],$$

где ξ_{ri} , ξ_{sj} — стехеометрические коэффициенты компонентов i и j в реакциях с индексами r и s соответственно, $r, s = 1, 2, \dots, \alpha$.

5.5. Интегральные скобки, записанные через интегралы $\Omega^{(l,s)}$

$$[\mathbf{W}_i; \mathbf{W}_j]_{ij} = -8 \frac{\sqrt{m_i m_j}}{(m_i + m_j)} \Omega_{ij}^{(1,1)}, \quad (5.106)$$

$$[\mathbf{W}_i; S_{3/2}^{(1)}(W_j^2) \mathbf{W}_j]_{ij} = 8 \frac{\sqrt{m_i m_j}}{(m_i + m_j)} \left\{ \Omega_{ij}^{(1,2)} - \frac{5}{2} \Omega_{ij}^{(1,1)} \right\}, \quad (5.107)$$

$$\begin{aligned} [S_{3/2}^{(1)}(W_i^2) \mathbf{W}_i; S_{3/2}^{(1)}(W_j^2) \mathbf{W}_j]_{ij} = \\ = -8 \frac{(m_i m_j)^{3/2}}{(m_i + m_j)^3} \left\{ \frac{55}{4} \Omega_{ij}^{(1,1)} - 5 \Omega_{ij}^{(1,2)} + \Omega_{ij}^{(1,3)} - 2 \Omega_{ij}^{(2,2)} \right\}, \end{aligned} \quad (5.108)$$

$$\begin{aligned} [S_{3/2}^{(1)}(W_i^2) \mathbf{W}_i; S_{3/2}^{(2)}(W_j^2) \mathbf{W}_j]_{ij} = -8 \frac{m_i (m_i m_j)^{3/2}}{(m_i + m_j)^4} \left\{ \frac{595}{16} \Omega_{ij}^{(1,1)} - \right. \\ \left. - \frac{189}{8} \Omega_{ij}^{(1,2)} + \frac{19}{4} \Omega_{ij}^{(1,3)} - \frac{1}{2} \Omega_{ij}^{(1,4)} - 7 \Omega_{ij}^{(2,2)} + 2 \Omega_{ij}^{(2,3)} \right\}, \end{aligned} \quad (5.109)$$

$$\begin{aligned} [S_{3/2}^{(2)}(W_i^2) \mathbf{W}_i; S_{3/2}^{(2)}(W_j^2) \mathbf{W}_j]_{ij} = \\ = -\frac{(m_i m_j)^{5/2}}{(m_i + m_j)^5} \left\{ \frac{8505}{64} \Omega_{ij}^{(1,1)} - \frac{833}{8} \Omega_{ij}^{(1,2)} + \frac{241}{8} \Omega_{ij}^{(1,3)} - \frac{7}{2} \Omega_{ij}^{(1,4)} + \right. \\ \left. + \frac{1}{4} \Omega_{ij}^{(1,5)} - \frac{77}{2} \Omega_{ij}^{(2,2)} + 14 \Omega_{ij}^{(2,3)} - 2 \Omega_{ij}^{(2,4)} + 2 \Omega_{ij}^{(3,3)} \right\}, \end{aligned} \quad (5.110)$$

$$[\mathbf{W}_i; \mathbf{W}_i]_{ij} = 8 \frac{m_j}{(m_i + m_j)} \Omega_{ij}^{(1,1)}, \quad (5.111)$$

$$[\mathbf{W}_i; S_{3/2}^{(1)}(W_i^2) \mathbf{W}_i]_{ij} = -8 \frac{m_j^2}{(m_i + m_j)^2} \left\{ \Omega_{ij}^{(1,2)} - \frac{5}{2} \Omega_{ij}^{(1,1)} \right\}, \quad (5.112)$$

$$\begin{aligned} [\mathbf{W}_i; S_{3/2}^{(2)}(W_i^2) \mathbf{W}_i]_{ij} = \\ = 4 \frac{m_j^3}{(m_i + m_j)^3} \left\{ \frac{35}{4} \Omega_{ij}^{(1,1)} - 7 \Omega_{ij}^{(1,2)} + \Omega_{ij}^{(1,3)} \right\}, \end{aligned} \quad (5.113)$$

$$\begin{aligned} [S_{3/2}^{(1)}(W_i^2) \mathbf{W}_i; S_{3/2}^{(1)}(W_i^2) \mathbf{W}_i]_{ij} = 8 \frac{m_j}{(m_i + m_j)^3} \left\{ \frac{5}{4} (6m_i^2 + 5m_j^2) \Omega_{ij}^{(1,1)} - \right. \\ \left. - 5m_j^2 \Omega_{ij}^{(1,2)} + m_j^2 \Omega_{ij}^{(1,3)} + 2m_i m_j \Omega_{ij}^{(2,2)} \right\}, \end{aligned} \quad (5.114)$$

$$\begin{aligned}
& [S_{3/2}^{(1)}(W_i^2)\mathbf{W}_i; S_{3/2}^{(2)}(W_i^2)\mathbf{W}_i]_{ij} = \\
& = 8 \frac{m_j^2}{(m_i + m_j)^4} \left\{ \frac{35}{16} (12m_i^2 + 5m_j^2) \Omega_{ij}^{(1,1)} - \frac{21}{8} (4m_i^2 + 5m_j^2) \Omega_{ij}^{(1,2)} + \right. \\
& \left. + \frac{19}{4} m_j^2 \Omega_{ij}^{(1,3)} - \frac{1}{2} m_j^2 \Omega_{ij}^{(1,4)} + 7m_i m_j \Omega_{ij}^{(2,2)} - 2m_i m_j \Omega_{ij}^{(2,3)} \right\}, \quad (5.115)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& [S_{3/2}^{(2)}(W_i^2)\mathbf{W}_i; S_{3/2}^{(2)}(W_i^2)\mathbf{W}_i]_{ij} = \\
& = 8 \frac{m_j}{(m_i + m_j)^5} \left\{ \frac{35}{64} (40m_i^4 + 168m_i^2 m_j^2 + 35m_j^4) \Omega_{ij}^{(1,1)} - \right. \\
& - \frac{7}{8} m_j^2 (84m_i^2 + 35m_j^2) \Omega_{ij}^{(1,2)} + \frac{1}{8} m_j^2 (108m_i^2 + 133m_j^2) \Omega_{ij}^{(1,3)} - \\
& - \frac{7}{2} m_j^4 \Omega_{ij}^{(1,4)} + \frac{1}{4} m_j^4 \Omega_{ij}^{(1,5)} + \frac{7}{2} m_i m_j (4m_i^2 + 7m_j^2) \Omega_{ij}^{(2,2)} - \\
& \left. - 14m_i m_j^3 \Omega_{ij}^{(2,3)} + 2m_i m_j^3 \Omega_{ij}^{(2,4)} + 2m_i^2 m_j^2 \Omega_{ij}^{(3,3)} \right\}, \quad (5.116)
\end{aligned}$$

и, если $\mathbf{W} = W_i W_i - \frac{1}{3} W_i^2 \mathbf{U}$, где \mathbf{U} — единичный тензор, то

$$[\mathbf{W}_i; \mathbf{W}_j]_{ij} = -\frac{16}{3} \frac{m_i m_j}{(m_i + m_j)^2} \left\{ 5\Omega_{ij}^{(1,1)} - \frac{3}{2} \Omega_{ij}^{(2,2)} \right\}, \quad (5.117)$$

$$[\mathbf{W}_i; \mathbf{W}_i]_{ij} = \frac{16}{3} \frac{m_j}{(m_i + m_j)^2} \left\{ 5m_i \Omega_{ij}^{(1,1)} + \frac{3}{2} m_j \Omega_{ij}^{(2,2)} \right\}. \quad (5.118)$$

Список литературы к главе 5

1. Чепмен С., Каулинг Т. Математическая теория неоднородных газов. — М.: Изд-во иностр. лит., 1960. — 510 с.
2. Гиршфельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей. — М.: Изд-во иностр. лит., 1961. — 930 с.
3. Ферцигер Дж., Капер Г. Математическая теория процессов переноса в газах. — М.: Мир, 1976. — 554 с.
4. Жданов В.М. Процессы переноса в многокомпонентной плазме. — М.: Физматлит, 2009. — 280 с.
5. Zhdanov V.M. Transport Processes in Multicomponent Plasma. — London—New York: Taylor & Francis, 2002. — 296 p.
6. Жданов В.М., Алиевский М.Я. Процессы переноса и релаксации в молекулярных газах. — М.: Наука, 1989. — 335 с.
7. Вальдман Л. Явления переноса при среднем давлении // Термодинамика газов: Сб. — М.: Машиностроение, 1970. — С. 169–414.
8. Мэйсон Е.А. Перенос в нейтральном газе // Кинетические процессы в газах и плазме/Под ред. А. Хохштима. — М.: Атомиздат, 1972. — С. 52–91.

9. Алиевский М. Я., Жданов В. М. Явления переноса и релаксации в многоатомных газовых смесях // ЖЭТФ. 1968. Т. 55. С. 221–232.
10. Колесников А. Ф., Тирский Г. А. Уравнения гидродинамики для частично ионизованных многокомпонентных смесей газов с коэффициентами переноса в высших приближениях // Молекулярная газодинамика. — М.: Наука, 1982. — С. 20–44.
11. Жданов В. М., Тирский Г. А. Применение метода моментов к выводу уравнений переноса газа и плазмы с коэффициентами переноса в высших приближениях // Прикл. матем. и мех. 2003. Т. 67, вып. 3. С. 406–433.
12. Wang Chang C. S., Uhlenbeck G. E., de Boer J. The heat conductivity and viscosity of polyatomic gases // Studies Statistical Mechanics / Ed. by J. de Boer, C. E. Uhlenbeck. — Amsterdam: North-Holland, 1964. — V. 2. — P. 243–263.
13. Transport Properties of Fluids / Ed. I. Millat, J. H. Dymond and C. A. Nieto de Castro. — London: Cambridge University Press, 1996. — 478 p.
14. Butler J. N., Brokaw R. S. Thermal conductivity of gas mixtures in chemical equilibrium // J. Chem. Phys. 1957. V. 26, No. 6. P. 1636–1643.
15. Соколова И. А. Коэффициенты переноса воздуха в области температур от 3000 до 20 000 К и давлений 0,1, 1, 10, 100 атм // ПМТФ. 1973. № 2. С. 80–90.
16. Финкельбург В., Меккер Г. Электрические дуги и термическая плазма. — М.: Изд-во иностр. лит., 1961. — 371 с.
17. Гордеев О. А., Комов А. Л., Рогов В. С., Ширков П. Д. Расчет коэффициентов переноса низкотемпературной азотной плазмы // Теоретические и прикладные проблемы вычислительной математики: Сб. — М.: ИПМ, 1981. — С. 56–58.
18. Елецкий А. В., Палкина Л. А., Смирнов Б. М. Явления переноса в слабоионизованной плазме. — М.: Атомиздат, 1975. — 334 с.

Глава 6

ТРАНСПОРТНЫЕ СЕЧЕНИЯ И Ω -ИНТЕГРАЛЫ ДЛЯ РЯДА МОДЕЛЬНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ ПАРНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЧАСТИЦ

Коэффициенты переноса (кинетические коэффициенты) атомарных и молекулярных газов и газовых смесей выражаются через интегральные скобки от полиномов Сонина (см. гл. 5). Интегральные скобки являются линейными комбинациями Ω -интегралов, называемых также интегралами переноса, или транспортными интегралами [1–5]. Ω -интегралы имеют размерность $\text{см}^3/\text{с}$. Наряду с Ω -интегралами в литературе используются усредненные обобщенные транспортные сечения $\overline{Q}_{ij}^{(\ell,s)}$, называемые также интегралами столкновений [5–7] и имеющие размерность см^2 или \AA^2 . Ω -интегралы и интегралы столкновений являются функциями температуры. В подынтегральные функции входят обобщенные транспортные сечения $Q_{ij}^{(\ell)}(g)$, зависящие от относительной скорости сталкивающихся частиц. Сечения $Q_{ij}^{(\ell)}(g)$ могут быть вычислены, если известны вид и параметры потенциалов парного взаимодействия составляющих газ частиц компонентов i и j . Для упругих столкновений атомов или молекул по известному потенциалу взаимодействия частиц из решения классической или квантовой механической задачи рассеяния определяется зависимость угла рассеяния χ как функции прицельного параметра b и значения относительной скорости g сталкивающихся частиц. Соответствующая зависимость потенциальной энергии от координат взаимодействующих частиц при заданной потенциальной энергии взаимодействия частиц $U(R, \chi(b, g), \varphi)$ находится аналитически или численно. При практических вычислениях коэффициентов переноса используются специально сконструированные модельные потенциалы, описывающие основные свойства межмолекулярного взаимодействия и содержащие, как правило, небольшое число параметров. Значения параметров потенциалов взаимодействия подбираются на основе сравнения с экспериментом и теоретических расчетов. В зависимости от химического состава частиц и характера их взаимодействия при расчетах используется более 140 модельных потенциалов [8]. Ниже рассматриваются часто используемые сфери-

чески симметричные модельные потенциалы $U(R)$ и отвечающие им аналитические или табличные значения транспортных сечений $Q_{ij}^{(\ell)}(g)$ и интегралов $\Omega_{ij}^{(\ell,s)}$ (или $\overline{Q_{ij}^{(\ell,s)}}$).

В разд. 6.1 рассмотрены потенциалы взаимодействия, которые используются для описания парных столкновений нейтральных частиц. Для газов и газовых смесей, образованных из двухатомных и многоатомных молекул, в которых возбуждены вращательные и колебательные степени свободы, коэффициенты переноса выражаются через обобщенные Ω -интегралы, которые включают в себя дифференциальные сечения неупругих столкновений частиц $\sigma_{ij}^{km}(g, \chi, \varphi)$. Эти сечения зависят не только от относительной скорости частиц g и угловых переменных χ и φ , но также от начального и конечного внутренних состояний частиц. Поэтому расчет Ω -интегралов включает интегрирование по динамическим переменным, характеризующим поступательное движение частиц, и суммирование по их внутренним состояниям.

В разд. 6.2 рассмотрены модели, описывающие потенциалы взаимодействия заряженных частиц (ионов и электронов) с атомами и молекулами, соответствующие сечения и Ω -интегралы. Взаимодействие иона с нейтральной частицей определяется совокупным действием сил различного характера, включая химические (или валентные) силы, проявляющиеся на коротких расстояниях, электростатические, индукционные и дисперсионные силы, действующие на больших расстояниях, и обменные силы [1, 9]. Поэтому используются составные потенциалы. Наиболее простой является модель 6.2.1, в которой используемая при коротких расстояниях модель твердых сфер сшивается с дальнедействующим поляризационным потенциалом. Более высокую точность обеспечивает использование гибридных потенциалов [5, 7, 8] (модель 6.2.2). Модель 6.2.3 описывает столкновения атомов (молекул) с ионами того же газа, где существенный вклад в сечения вносит процесс резонансной перезарядки.

Потенциалы взаимодействия электронов с атомами и молекулами изучены недостаточно. Простые модели 6.2.4–6.2.7 пригодны только для оценок. Поэтому также приведены формулы, аппроксимирующие данные таблиц, рассчитанных с использованием сложных модельных потенциалов или экспериментальных сечений столкновений. Погрешность этих результатов может достигать десятков процентов.

Потенциалы взаимодействия, транспортные сечения и Ω -интегралы, описывающие столкновения заряженных частиц между собой, приведены в п. 6.3.1–6.3.4. Рассмотрены кулоновский потенциал, обрезанный кулоновский потенциал, а также дебаевский потенциал. Применение борновского приближения устраняет расходимость транспортного сечения и по углу рассеяния, и при низких значениях скорости относительного движения сталкивающихся частиц.

В разд. 6.4 приводятся рассчитанные с использованием гибридных потенциалов интегралы столкновений для конкретных пар нейтраль-

ных и заряженных частиц. Подробные таблицы Ω -интегралов для столкновений электронов с атомами и молекулами различных газов были рассчитаны с использованием экспериментальных зависимостей транспортных сечений от энергии относительного движения электронов и тяжелых частиц.

Обозначения

R — расстояние между центрами сталкивающихся частиц

μ — приведенная масса молекул компонентов i и j

γ — безразмерная относительная скорость

$Q_{ij}^{(\ell)}(g_{ij})$ — обобщенное транспортное сечение

$\overline{Q_{ij}^{(\ell,s)}}$ — интеграл столкновений (усредненное обобщенное транспортное сечение)

Определения

Безразмерная относительная скорость

$$\gamma = \left(\frac{\mu_{ij}}{2kT} \right)^{1/2} g_{ij}.$$

Приведенная масса молекул i и j

$$\mu_{ij} = \frac{m_i m_j}{m_i + m_j}.$$

$\Omega_{ij}^{(\ell,s)}$ -интегралы (по [1, 2, 4])

$$\Omega_{ij}^{(\ell,s)} = \left(\frac{kT}{2\pi\mu_{ij}} \right)^{1/2} \int_0^\infty \exp(-\gamma^2) \gamma^{2s+3} Q_{ij}^{(\ell)}(g_{ij}) d\gamma. \quad (6.1)$$

Обобщенные транспортные сечения

$$Q_{ij}^{(\ell)}(g_{ij}) = 2\pi \int_0^\infty [1 - \cos^\ell \chi_{ij}(b, g_{ij})] b db \quad (6.2)$$

или

$$Q_{ij}^{(\ell)}(g_{ij}) = 2\pi \int_0^\pi [1 - \cos^\ell \chi] \sigma_{ij}(\chi, g) \sin \chi d\chi. \quad (6.3)$$

Интегралы столкновений $\overline{Q_{ij}^{(\ell,s)}}$ (усредненные обобщенные транспортные сечения)

$$\overline{Q_{ij}^{(\ell,s)}} = \frac{\Omega_{ij}^{(\ell,s)}}{\frac{(s+1)!}{2} \left[1 + \frac{1}{2} \cdot \frac{1 + (-1)^\ell}{\ell + 1} \right]} \left(\frac{2\pi\mu_{ij}}{kT} \right)^{1/2}. \quad (6.4)$$

Для Ω -интегралов справедливо рекуррентное соотношение

$$\frac{\Omega^{(\ell,s+1)}}{\Omega^{(\ell,s)}} = 1 + \frac{1}{s+2} \frac{d \ln \Omega^{(\ell,s)}}{dT}. \quad (6.5)$$

Комментарии

1. Приведенные Ω^* -интегралы являются отношением обычных Ω -интегралов к соответствующим интегралам $[\Omega^{(\ell,s)}]_{\text{тв. сф.}}$ (5.2), вычисленным для модели твердых сфер (см. ниже).

2. Используются также интегралы столкновений (усредненные обобщенные транспортные сечения) [5–7], имеющие ту же размерность, что и сечения рассеяния в модели твердых сфер:

$$\overline{Q_{ij}^{(\ell,s)}} = \pi \sigma_{ij}^2 \Omega_{ij}^{(\ell,s)*}.$$

3. Безразмерные комбинации приведенных Ω^* -интегралов фигурируют в выражениях для коэффициентов переноса для многокомпонентных смесей (см. гл. 5).

4. Индекс ℓ принимает значение 1 от до 4.

Подробное описание основных из приводимых в этой главе моделей сечений см. введение, [1].

6.1. Взаимодействие нейтральных частиц

6.1.1. Модель твердых сфер

Потенциал взаимодействия

$$U(R) = \begin{cases} \infty; & R \leq \sigma, \\ 0; & R > \sigma. \end{cases} \quad (6.6)$$

Зависимость угла рассеяния от прицельного параметра $\chi(b)$

$$\cos\left(\frac{\chi}{2}\right) = \frac{b}{\sigma_{ij}}; \quad \sigma_{ij} = \frac{\sigma_i + \sigma_j}{2}. \quad (6.7)$$

Транспортные сечения

$$Q_{ij}^{(\ell)} = \left[1 - \frac{1 + (-1)^\ell}{2(\ell + 1)}\right] \pi \sigma_{ij}^2. \quad (6.8)$$

Ω -интегралы

$$[\Omega_{ij}^{(\ell,s)}]_{\text{тв. сф.}} = \left(\frac{kT}{2\pi\mu_{ij}}\right)^{1/2} \frac{(s+1)!}{2} \left[1 - \frac{1 + (-1)^\ell}{2(\ell + 1)}\right] \pi \sigma_{ij}^2. \quad (6.9)$$

Для однокомпонентного газа $[\Omega^{(\ell,s)}]_{\text{тв. сф.}}$ получается из выражения (6.9) заменой μ_{ij} на $m/2$ и σ_{ij} на σ .

Параметры модельного потенциала

σ_i — диаметр твердой сферы молекулы компонента i

σ_j — диаметр твердой сферы молекулы компонента j

σ_{ij} — расстояние между центрами двух сфер

Комментарии

1. Для модели твердых сфер угол рассеяния χ не зависит от относительной скорости частиц.

2. Модель твердых сфер используется как эталонная. По отношению к $[\Omega]_{\text{тв. сф.}}$ -интегралам определяются обычно Ω -интегралы для других моделей взаимодействия молекул.

Приведенные Ω^ -интегралы*

$$\Omega_{ij}^{(\ell,s)*} = \frac{\Omega_{ij}^{(\ell,s)}}{[\Omega_{ij}^{(\ell,s)}]_{\text{тв. сф.}}}. \quad (6.10)$$

Безразмерные комбинации приведенных Ω^ -интегралов*

$$\begin{aligned} A_{ij}^* &= \frac{\Omega_{ij}^{(2,2)*}}{\Omega_{ij}^{(1,1)*}}; & B_{ij}^* &= \frac{5\Omega_{ij}^{(1,2)*} - 4\Omega_{ij}^{(1,3)*}}{\Omega_{ij}^{(1,1)*}}; & C_{ij}^* &= \frac{\Omega_{ij}^{(1,2)*}}{\Omega_{ij}^{(1,1)*}}, \\ E_{ij}^* &= \frac{\Omega_{ij}^{(2,3)*}}{\Omega_{ij}^{(2,2)*}}; & F_{ij}^* &= \frac{\Omega_{ij}^{(3,3)*}}{\Omega_{ij}^{(1,1)*}}; & H_{ij}^* &= \frac{\Omega_{ij}^{(2,4)*}}{\Omega_{ij}^{(1,2)*}}. \end{aligned} \quad (6.11)$$

3. В высших приближениях используются интегралы с индексами до $\ell = 4$ и $s = 7$.

6.1.2. Модель точечного центра отталкивания

Потенциал взаимодействия

$$U(R) = \begin{cases} \infty; & R \leq \sigma, \\ (\sigma/R)^\nu; & R > \sigma. \end{cases} \quad (6.12)$$

Зависимость $\chi(b, g)$

$$\chi = \pi - 2 \int_0^{y_0} \left[1 - y^2 - \nu^{-1} \left(\frac{y}{z} \right)^\nu \right]^{-1/2} dy; \quad z = \frac{b}{\sigma_{ij}} \left(\frac{\mu_{ij} g^2}{2\nu} \right)^{1/\nu}. \quad (6.13)$$

Вид функции $y_0(z)$ устанавливается в результате решения уравнения

$$1 - y_0^2 - \left(\frac{y_0}{z} \right)^\nu \nu^{-1} = 0.$$

Транспортные сечения

$$Q_{ij}^{(\ell)}(g) = 2\pi \sigma_{ij}^{(2)} \left(\frac{\mu_{ij} g^2}{2\nu} \right)^{-\frac{2}{\nu}} A_\ell(\nu); \quad A_\ell(\nu) = \int_0^\infty [1 - \cos \chi(z, \nu)] z \, dz. \quad (6.14)$$

Ω -интегралы

$$\Omega_{ij}^{(\ell,s)} = \left(\frac{kT}{2\pi\mu_{ij}} \right)^{1/2} \left(\frac{\nu}{kT} \right)^{2/\nu} A_\ell(\nu) \Gamma\left(s + 2 - \frac{2}{\nu}\right) \pi \sigma_{ij}^2. \quad (6.15)$$

Аппроксимации интегралов столкновений для потенциала (6.12) приведены в [8] и имеют вид [9]

$$\begin{aligned}\overline{Q_{ij}^{(1,1)}} &= 2A_1 \left(\frac{C\nu}{kT} \right)^{2/n} \left(1 - \frac{1}{\nu} \right) \Gamma \left(2 - \frac{2}{\nu} \right), \\ \overline{Q_{ij}^{(2,2)}} &= A_2 \left(\frac{C\nu}{kT} \right)^{2/n} \left(3 - \frac{2}{\nu} \right) \left(1 - \frac{1}{\nu} \right) \Gamma \left(2 - \frac{2}{\nu} \right), \\ B^* &= \left(1 - \frac{2}{3\nu} \right) \left(1 + \frac{2}{\nu} \right), \\ \Gamma(x) &= 0,456(z - 1,5)^2 + 0,886; \quad 1 < z < 2, \\ A_1 &= 0,157x + 0,1756 + 1,806 \exp(-6,928x), \\ A_2 &= 0,157x + 0,1756 + 1,806 \exp(-6,928x), \\ x &= \ln \nu; \quad 4 \leq \nu \leq 24.\end{aligned}\tag{6.16}$$

Комментарии

1. Модель позволяет описывать только столкновения нейтральных частиц.

2. Погрешность аппроксимации составляет не более 1 %.

3. Представляющие практический интерес значения ν меняются от $\nu = 4$ (модель максвелловских молекул) до $\nu \rightarrow \infty$ (модель твердых сфер).

4. При $\nu = 4$ (модель максвелловских молекул) Ω -интегралы не зависят от температуры.

5. При $\nu \rightarrow \infty$ потенциал (6.12) вырождается в модель твердых сфер. При этом Ω -интегралы зависят от температуры как $T^{1/2}$.

6. Для большинства реальных нейтральных газов величина ν имеет значения, лежащие между $\nu = 9$ и $\nu = 15$.

7. Значения $A_1(\nu)$ и $A_2(\nu)$, необходимые при расчетах коэффициентов самодиффузии, бинарной диффузии, вязкости и теплопроводности, приводятся в табл. 6.1.

8. Недостаток рассматриваемой модели состоит в отсутствии дальнотействующей ветви сил притяжения молекул (нет потенциальной ямы).

Таблица 6.1. Значения функции $A_\ell(\nu)$

ν	4	6	8	10	12	14	20	24	∞
$A_1(\nu)$	0,298	0,306	0,321	0,333	0,346	0,356	—	—	0,500
$A_2(\nu)$	0,308	0,283	0,279	0,278	0,279	0,280	0,286	0,289	0,333

6.1.3. Потенциал Борна–Майера

Потенциал взаимодействия

$$U(R) = A \exp(-\beta R).\tag{6.17}$$

Результаты численных расчетов интегралов столкновений для потенциала Борна–Майера приведены в [10, 11]. Там же для интегралов столкновений представлены подробные таблицы в широком диапазоне

параметров потенциала. Варианты аппроксимации этих расчетов приведены в [5, 7]. Для аппроксимации интегралов столкновений $Q_{ij}^{(\ell,s)}(T)$ в виде двухпараметрических функций, зависящих от параметров A и β , вводится переменная ξ :

$$\xi = \ln A/kT. \quad (6.18)$$

Приведенные интегралы $\Omega_{ij}^{(\ell,s)*}$, нормированные на интегралы для модели твердых сфер, имеют вид

$$\Omega_{ij}^{(\ell,s)*} = \frac{8\xi^2 I_{ij}^{(\ell,s)}(\xi)}{\beta^2(s+1)! \left[1 - \frac{1}{2} \cdot \frac{1+(-1)^\ell}{1+\ell} \right]}. \quad (6.19)$$

Интегралы $I_{ij}^{(\ell,s)}$ и величины A^* , B^* , C^* (6.11) табулированы в [10] для значений $3,5 \leq \xi \leq 28,5$. Табличные значения $I_{ij}^{(\ell,s)}$, A^* , B^* , C^* аппроксимированы с помощью метода наименьших квадратов функциями вида [11]

$$f(\xi) = a_1 \frac{1 + a_2 \xi^{a_3}}{1 + a_4 \xi^{a_5}} \quad (6.20)$$

в [12] (см. табл. 6.2).

Таблица 6.2. Параметры аппроксимирующего выражения $f(\xi)$ [12]

	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5
$I^{(1,1)}$	0,08174	1,46296	1,00908	0,47814	1,01003
$I^{(1,2)}$	0,06046	3,31930	1,37075	0,30678	1,34167
$I^{(1,3)}$	0,08657	5,07475	1,61203	0,18615	1,55895
$I^{(1,4)}$	0,13786	9,77399	1,79748	0,12469	1,72399
$I^{(1,5)}$	0,24140	21,82675	1,96001	0,08801	1,86647
$I^{(2,2)}$	0,21816	1,24837	2,37222	0,49958	2,39267
$I^{(2,3)}$	0,33980	2,53626	1,83724	0,41895	1,84436
$I^{(2,4)}$	0,32647	8,86726	1,85884	0,29751	1,85269
$I^{(3,3)}$	0,61372	2,09324	1,39339	0,45257	1,38175
A^*	1,49126	0,07210	1,60165	0,09082	1,63775
B^*	1,92381	0,19312	1,36719	0,34596	1,38192
C^*	0,21094	2,30482	1,52717	0,51466	2,51450

Обозначения

R — расстояние между центрами масс сталкивающихся частиц

A , β — эмпирические параметры

$a_1 - a_5$ — параметры аппроксимирующего выражения.

Погрешность

Аппроксимационная формула (6.20) со значениями параметров из табл. 6.2 описывает результаты расчетов [10] с погрешностью менее 0,4 %.

Комментарии

1. Двухпараметрическая модель экспоненциального отталкивания является полуэмпирической. Она была введена Борном и Майером для описания отталкивания ионов с замкнутыми оболочками в ионных кристаллах [13]. Строгого обоснования модель не имеет, но хорошо подтверждается экспериментами по рассеянию пучков высокоэнергетических частиц [14].

2. Параметр A имеет размерность энергии, параметр β — размерность, обратную размерности межъядерного расстояния. Зависимость интегралов (6.19) от температуры заключена в переменной ξ .

3. Модель широко используется для изучения рассеяния пучков быстрых частиц [15, 16], удовлетворительно передает результаты квантовомеханических расчетов энергии отталкивания атомов [16–18], в том числе возбужденных атомов [19] и т. п.

4. Модель является достаточно удобной для практических расчетов, поскольку для нее имеются таблицы интегралов столкновений и их аналитические аппроксимации [7, 10–12, 20, 21].

5. Асимптотическое поведение потенциала при $R \rightarrow 0$ некорректно. Поэтому наряду с потенциалом Борна–Майера используется потенциал Бора $U(R) = (A/R) \exp(-\beta R)$ [8], дающий более правильную асимптотику.

6.1.4. Модель Сюзерленда*Потенциал взаимодействия*

$$U(R) = \begin{cases} \infty; & R \leq \sigma, \\ -\varepsilon(\sigma/R)^\nu; & R > \sigma. \end{cases} \quad (6.21)$$

Комментарий

1. В модели Сюзерленда часть потенциала взаимодействия, описывающая отталкивание, соответствует потенциалу твердых сфер, где σ — диаметр твердого ядра молекулы, а притяжение — степенной зависимости потенциала от расстояния. Расчет функции $\chi(b, g)$ заметно упрощается, если часть потенциала, отвечающая притяжению, считается малой.

2. Значения интегралов столкновений $\overline{Q_{ij}^{(1,1)*}}$ и $\overline{Q_{ij}^{(2,2)*}}$, связанные соотношением (6.4) с Ω -интегралами, приведены в [22] для $\nu = 6$.

3. Если в области, где $U(R) < 0$, потенциал мал по сравнению с ε , Ω -интегралы, необходимые для расчета коэффициентов самодиффузии,

вязкости и теплопроводности, имеют вид

$$\Omega_{ij}^{(1,1)} = [\Omega_{ij}^{(1,1)}]_{\text{тв. сф.}} \left(1 + \frac{S_D}{T}\right); \quad \Omega_{ij}^{(2,2)} = [\Omega_{ij}^{(2,2)}]_{\text{тв. сф.}} \left(1 + \frac{S_\eta}{T}\right), \quad (6.22)$$

где

$$S_D = i^{(1)}(\nu) \frac{\varepsilon}{k}; \quad S_\eta = i^{(2)}(\nu) \frac{\varepsilon}{k}. \quad (6.23)$$

П а р а м е т р ы

ν — степенной показатель части потенциала, соответствующей притяжению

ε — максимальное значение энергии притяжения молекул.

Значения функций $i^{(1)}(\nu)$ и $i^{(2)}(\nu)$ приводятся в табл. 6.3.

Т а б л и ц а 6.3. Значения
функций $i^{(1)}(\nu)$ и $i^{(2)}(\nu)$

ν	$i^{(1)}(\nu)$	$i^{(2)}(\nu)$
2	0,2662	0,2336
3	0,2276	0,2118
4	0,2010	0,1956
6	0,1667	0,1736
8	0,1444	0,1556

6.1.5. Потенциал Ленарда–Джонса

Потенциал взаимодействия

$$U(R) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{R} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R} \right)^6 \right]. \quad (6.24)$$

П а р а м е т р ы

σ — расстояние, на котором потенциальная функция меняет знак

ε — минимальное значение потенциала (в точке $R = 2^{1/6}\sigma$).

Параметры потенциала σ и ε зависят от сорта $i\alpha$ сталкивающихся частиц. В [1] приведены таблицы значений интегралов $\Omega^{(\ell,s)*}$ для $\ell = 1-4$ и $s = 1-4$ в зависимости от величины $x = \lg(T/\varepsilon)$ в диапазоне значений $T^* = T/\varepsilon = 0,3-400$. С погрешностью не более 1–2% эти таблицы аппроксимируются следующими функциями [9]:

$$\begin{aligned} \lg^* \Omega^{(1,1)} &= -a_1 x + a_2 + a_3 \exp(a_4 x), \\ a_1 &= 0,517; \quad a_2 = 0,158; \quad a_3 = 0,0074; \quad a_4 = 4,51; \quad x \leq 0,5, \\ a_1 &= 0,235; \quad a_2 = 0,089; \quad a_3 = 0,000055; \quad a_4 = 5,72; \quad 0,5 < x < 1,0, \\ a_1 &= 0,19; \quad a_2 = 0,069; \quad a_3 = 0,00057; \quad a_4 = 1,79; \quad x > 1,0. \end{aligned} \quad (6.25)$$

Комментарии

1. Потенциал взаимодействия в виде (6.24) применяется для описания взаимодействия нейтральных неполярных частиц.

2. Зависимость $\chi(b, g)$ и соответствующие Ω -интегралы получаются с помощью численных методов.

3. Для этой модели приведенные Ω -интегралы или $\Omega^{(\ell, s)*}$ являются универсальной функцией приведенной температуры $T^* = kT/\varepsilon$. Таблицы значений $\Omega^{(\ell, s)*}(T^*)$ для различных ℓ, s приводятся в [1, 23].

4. Формулы, аппроксимирующие Ω -интегралы для $\ell = 1-4, s = 1-7$, приведены в [24].

5. Модель Ленарда–Джонса является наиболее часто используемой в практических расчетах коэффициентов переноса при умеренных температурах газа. Параметры σ и ε подбираются эмпирически из сравнения с экспериментальными зависимостями коэффициентов вязкости или самодиффузии и второго вириального коэффициента в определенном интервале температур.

6. Наиболее широко по сравнению с другими используется комбинационное правило для частиц разных компонентов

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{2}(\sigma_{ii} + \sigma_{jj}); \quad \varepsilon_{ij} = (\varepsilon_{ii} \varepsilon_{jj})^{1/2}. \quad (6.26)$$

7. Используются также потенциал Ми и обобщенный потенциал Ленарда–Джонса, простое представление для которых имеет вид [8]

$$U(R) = \varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{R} \right)^n - \left(\frac{\sigma}{R} \right)^m \right]. \quad (6.27)$$

Более общие представления потенциалов Ми и Ленарда–Джонса приведены в [8, 24, 25]. Для значений $n = 6, m = 8 \div \infty$ получены подробные высокоточные таблицы интегралов столкновений [24, 25]. В [25] для этих интегралов предложены аппроксимационные формулы, погрешность которых не превышает 0,3%.

6.1.6. Модифицированная модель (6-хр) Букингема

Потенциал взаимодействия

$$U(R) = \frac{\varepsilon}{1 - (6/\beta)} \left\{ \frac{6}{\beta} \exp \left[\beta \left(1 - \frac{R}{\sigma} \right) \right] - \left(\frac{\sigma}{R} \right)^6 \right\}, \quad (6.28)$$

$$R > R_{\max}; \quad U(R) = \infty; \quad R < R_{\max}.$$

Параметры

ε — глубина потенциальной ямы

σ — расстояние, соответствующее минимуму потенциальной ямы

β — ширина потенциальной ямы

R_{\max} — значение R , при котором функция $U(R)$ максимальна. Это соответствует наименьшему из корней уравнения

$$\left(\frac{R}{\sigma}\right)^7 \exp\left(-\beta\frac{R}{\sigma}\right) = \exp(-\beta). \quad (6.29)$$

Комментарии

1. Модель имеет преимущества перед моделью Ленарда–Джонса, так как физически реальная потенциальная функция на малых расстояниях ближе к экспоненциальной, чем к степенной зависимости. Кроме того, она содержит три параметра ε , β и σ , что позволяет варьировать как ширину, так и глубину потенциальной ямы. Для уменьшения вычислительных трудностей значение β часто фиксируется и берется в интервале 12–16; при этом модель становится двухпараметрической.

2. Как и в модели Ленарда–Джонса, приведенные Ω -интегралы или $\Omega_{ij}^{(\ell,s)*}$ являются универсальной функцией приведенной температуры $T^* = kT/\varepsilon$. Таблицы приведенных интегралов $\Omega_{ij}^{(\ell,s)*}(T^*)$ и их безразмерных комбинаций (6.10), (6.11) для различных ℓ, s приводятся в [1, 2].

3. Параметры σ и ε при заданном β подбираются эмпирически при сравнении с экспериментальными данными по термодинамическим и транспортным свойствам разреженных газов [7, 9].

4. Обсуждение различных модификаций потенциала Букингема, гибридных потенциалов на его основе, например, потенциала Букингема–Корнера, и существующих расчетов Ω -интегралов проведено в [8].

6.1.7. Потенциал Морзе

Потенциал взаимодействия

$$U(R) = D[\exp(-2\beta\xi) - 2\exp(-\beta\xi)], \quad (6.30)$$

$$\xi = \frac{R - R_e}{R_e}; \quad \beta = \frac{\omega_e}{2(B_e D)^{1/2}}.$$

Параметры

R_e — равновесное расстояние

ω_e — фундаментальная частота колебаний молекулы

D — энергия диссоциации молекулы

B_e — вращательная постоянная молекулы.

Подробные таблицы интегралов $\Omega_{ij}^{(\ell,s)}$ приведены в [2], подробные таблицы усредненных сечений $Q_{ij}^{(\ell,s)}$ — в [2, 26–28].

Комментарии

1. Модель описывает энергию взаимодействия двух атомов в связанных состояниях в области минимума потенциальной ямы.

2. Все параметры модели можно выразить через физические величины, известные либо из спектрального анализа, либо из квантовомеханических расчетов.

3. Модель широко используется для описания взаимодействия атомов, молекул, включая частицы в возбужденных состояниях, а также ионов.

4. Существуют другие формы записи потенциала Морзе [8], для которых также выполняются утверждения комментария 3.

5. К недостаткам модели следует отнести конечное значение энергии при $R \rightarrow 0$ и отличающуюся от экспериментальных данных асимптотику при $R \rightarrow \infty$.

6.2. Взаимодействие заряженных частиц с нейтральными частицами

6.2.1. Поляризационный потенциал взаимодействия ионов с молекулами (атомами)

Потенциал

$$U(R) = \begin{cases} \infty; & R \leq \sigma, \\ \frac{\alpha e^2}{2R^4}; & R > \sigma. \end{cases} \quad (6.31)$$

Транспортное сечение $Q^{(1)}$ — см. введение, [1], а также [29–31].
Модель Т. 11.

$$\begin{aligned} Q^{(1)}(\varepsilon) &= 2,21\pi e(\alpha/2\varepsilon)^{1/2} && \text{при } \varepsilon < \varepsilon_k, \\ Q^{(1)}(\varepsilon) &= \pi\sigma^2 && \text{при } \varepsilon \geq \varepsilon_k, \\ \varepsilon &= \frac{\mu_{ij}g^2}{2}; \quad \varepsilon_k = \frac{2,44\alpha e^2}{\sigma^4}. \end{aligned} \quad (6.32)$$

Интеграл столкновений

$$\begin{aligned} \overline{Q^{(1,1)}}(T) &= 1,105\pi e \left(\frac{\alpha}{2kT} \right)^{1/2} f_1(x) + \frac{\pi\sigma^2}{2} f_2(x), \\ f_1(x) &= \frac{3\sqrt{\pi}}{4} \operatorname{erf}(\sqrt{x}) - \exp(-x) \left(x^{3/2} + \frac{3}{2} x^{1/2} \right), \\ \operatorname{erf}(x) &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \exp(-t^2) dt - \text{интеграл ошибок}, \\ f_2(x) &= \exp(-x) \cdot (x^2 + 2x + 2); \quad x = \frac{\varepsilon_k}{kT}, \\ \overline{Q^{(1,2)}}(T) &= 0,8333 \overline{Q^{(1,1)}}(T); \quad \overline{Q^{(1,3)}}(T) = 0,7292 \overline{Q^{(1,1)}}(T), \\ \overline{Q^{(2,2)}}(T) &= 0,8710 \overline{Q^{(1,1)}}(T). \end{aligned} \quad (6.33)$$

Обозначение

α — поляризуемость молекулы (атома)

6.2.2. Гибридный потенциал взаимодействия иона с молекулой (атомом)

Потенциал взаимодействия

$$U(R) = \begin{cases} A \exp(-\beta R); & R \leq R_1, \\ B_1 + B_2(R_2 - R) + B_3(R_2 - R)^2 + B_4(R_2 - R)^3; & R_1 < R < R_2, \\ \frac{a}{R^n} - \frac{b}{R^m} - \frac{c}{R^4}; & R \geq R_2. \end{cases} \quad (6.34)$$

Комментарии

1. Отталкивательная ветвь потенциала описывается моделью твердых сфер или моделью Борна–Майера (см. п. 6.1.3).

2. На больших расстояниях превалируют поляризационные силы.

3. На промежуточных расстояниях необходимо учитывать дисперсионные силы и обменные силы второго порядка.

4. Наиболее точные расчеты интегралов столкновений ионов с атомами и молекулами отличного от иона химического состава с использованием гибридного потенциала проведены в [7, 9, 33, 34].

5. Аппроксимации интегралов столкновений [34] даны в зависимости от двух параметров ξ и β в [7].

Интеграл столкновений

$$\overline{Q_{ij}^{(1,1)}}(T) = 1,827\beta^{-2}\xi^{2,2405}\exp(-0,01337\xi). \quad (6.35)$$

В табл. 6.4 для расчетов интегралов столкновений $\overline{Q_{ij}^{(\ell,s)}}$ более высоких порядков ℓ и s представлены аппроксимационные выражения для относительных безразмерных величин $\omega^{\ell,s} = \overline{Q_{ij}^{(\ell,s)}}(T)/\overline{Q_{ij}^{(1,1)}}(T)$.

Таблица 6.4. Аппроксимационные выражения для $\omega^{\ell,s}$

$$\begin{aligned} \omega^{1,2} &= \begin{cases} 0,532 + 0,095\xi - 0,0060\xi^2, & \xi \leq 7,0, \\ 0,0752 + 0,078 \ln \xi, & \xi > 7,0; \end{cases} \\ \omega^{1,3} &= \begin{cases} 0,247 + 0,147\xi - 0,0093\xi^2, & \xi \leq 6,5, \\ 0,4874 + 0,173 \ln \xi, & \xi > 6,5; \end{cases} \\ \omega^{1,4} &= \begin{cases} 0,053 + 0,181\xi - 0,0112\xi^2, & \xi \leq 7,0, \\ 0,4416 + 0,1694 \ln \xi, & \xi > 7,0; \end{cases} \\ \omega^{1,5} &= \begin{cases} -0,086 + 0,203\xi - 0,0124\xi^2, & \xi \leq 7,0, \\ 0,3274 + 0,2058 \ln \xi, & \xi > 7,0; \end{cases} \\ \omega^{2,2} &= \begin{cases} 1,539 - 0,067\xi + 0,0032\xi^2, & \xi \leq 8,0, \\ 1,331 - 0,0166\xi, & \xi > 8,0; \end{cases} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\omega^{2,3} &= \begin{cases} 1,046 + 0,041\xi - 0,004\xi^2, & \xi \leq 8,0, \\ 1,12, & \xi > 8,0; \end{cases} \\ \omega^{2,4} &= \begin{cases} 0,707 + 0,111\xi - 0,0085\xi^2, & \xi \leq 8,0, \\ 1,055, & \xi > 8,0; \end{cases} \\ \omega^{3,3} &= \begin{cases} 0,885 + 0,043\xi - 0,0033\xi^2, & \xi \leq 8,0, \\ 1,030, & \xi > 8,0. \end{cases}\end{aligned}$$

Точность представленных аппроксимаций $\overline{Q_{ij}^{(\ell,s)}}$ в указанных интервалах ξ не хуже 1–2 %.

6.2.3. Модель Фирсова

При вычислении Ω -интегралов для столкновений ионов с атомами и молекулами одинакового химического состава ($X^+ + X$, $X^- + X$) используются сечения упругого столкновения, равные удвоенному сечению перезарядки [4]: $Q^{(1)} = 2Q_{\text{ex}}$. Сечения резонансной перезарядки рассчитываются по формуле Фирсова (см. введение, [1]).

Транспортное сечение $Q^{(1)}$

$$\begin{aligned}Q_{\text{ex}}(\varepsilon) &= \pi a_0^2 \frac{\text{Ry}}{IP} \ln^2 \sqrt{\frac{E}{\varepsilon} \frac{\mu}{m_e}}; \quad \varepsilon \geq \varepsilon^*; \\ Q_{\text{ex}}(\varepsilon) &= 2\pi \sqrt{\frac{\alpha e^2}{2\varepsilon}}; \quad \varepsilon < \varepsilon^*,\end{aligned}\tag{6.36}$$

где ε^* определяется из трансцендентного уравнения

$$\varepsilon^* = \frac{2\alpha e^2}{a_0^4} \frac{E^2}{\text{Ry}^2} \left[\ln \left(100 \sqrt{\frac{E}{\varepsilon^*} \frac{\mu}{m_e}} \right) \right]^{-4},$$

$E = IP$ для положительных ионов, $E = EA$ для отрицательных ионов.

Интеграл столкновений

$$\begin{aligned}\overline{Q_{i,j}^{(1,1)}}(T) &= \pi e \left(\frac{\alpha}{2kT} \right)^{1/2} f_1(x) + \frac{\pi a_0^2 \text{Ry}}{2E} \left[\ln \left(100 \sqrt{\frac{E}{\varepsilon^*} \frac{\mu}{m_e}} \right) \right] f_2(x), \\ f_1(x) &= \frac{3\sqrt{\pi}}{4} \text{erf}(\sqrt{x}) - \exp(-x) \left(x^{3/2} + \frac{3}{2} x^{1/2} \right), \\ \text{erf}(x) &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \exp(-t^2) dt - \text{интеграл ошибок}, \\ f_2(x) &= (x^2 + 2x + 2) \cdot \exp(-x), \quad x = \frac{\varepsilon^*}{kT}, \quad \mu = \frac{m}{2}.\end{aligned}\tag{6.37}$$

Обозначения

α — поляризуемость молекулы (атома)

m_e — масса электрона

a_0 — боровский радиус

IP — потенциал ионизации

EA — энергия сродства к электрону

R_y — постоянная Ридберга.

6.2.4. Приближение эффективного радиуса для столкновений электронов с нейтральными частицами

Потенциалы взаимодействия электронов с атомами и молекулами зависят от структуры электронной оболочки атома или молекулы. Примеры потенциалов, полученных в рамках классического описания взаимодействия электронов с нейтральными частицами, даны в [8]. В общем случае следует учитывать отталкивательное, дипольное, квадрупольное и обменное взаимодействие.

Сложность выражений для потенциалов взаимодействия не позволяет непосредственно по ним сразу рассчитывать интегралы $\Omega_{\text{en}}^{(\ell,s)}$ или $Q_{\text{en}}^{(\ell,s)}$ по формулам (6.1), (6.4). Поэтому для их расчета используются транспортные сечения рассеяния $Q^{(\ell)}(\varepsilon)$, зависящие от энергии относительного движения частиц ε и определенные экспериментально или методами квантовой теории рассеяния.

Определение Ω -интегралов, записанное через энергию относительного движения ε , соответствует работам [1, 2, 5] и приведено в [35]:

$$\Omega_{\text{en}}^{(\ell,s)} = \sqrt{\frac{kT_e}{8\pi\mu}} \left(\frac{1}{kT_e} \right)^{s+2} \int_0^\infty \exp\left(-\frac{\varepsilon}{kT_e}\right) \varepsilon^{s+1} Q^{(\ell)}(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (6.38)$$

Потенциал взаимодействия

$$U(R) = \begin{cases} \infty; & R \leq \sigma, \\ \alpha e^2 / 2R^4; & R > \sigma. \end{cases} \quad (6.39)$$

Транспортное сечение упругого столкновения электрона с нейтральной частицей

$$Q_{\text{en}}^{(1)} = 4\pi \left(L^2 + \frac{4\pi\alpha q L}{5a_0} + \frac{\pi^2 \alpha^2 q^2}{6(a_0)^2} \right); \quad q = \frac{\sqrt{2\mu\varepsilon}}{\hbar}. \quad (6.40)$$

Интеграл столкновений

$$\overline{Q_{\text{en}}^{(1,1)}} = 4\pi L^2 \left[1 + \frac{3\pi\sqrt{2\pi}}{10} \cdot \frac{\alpha\sqrt{\mu kT_e}}{La_0\hbar} + \frac{2\pi^2}{3} \left(\frac{\alpha\sqrt{\mu kT_e}}{La_0\hbar} \right)^2 \right]. \quad (6.41)$$

Обозначения

T_e — температура электронов плазмы

L — длина рассеяния электрона

R_y — постоянная Ридберга

IP — потенциал ионизации атома (молекулы)

a_0 — боровский радиус

$K_{\text{упр}}$ — константа скорости упругого столкновения.

ε — энергия относительного движения сталкивающихся частиц

Погрешность модели

Погрешность расчетов интегралов столкновений и Ω -интегралов определяется точностью задания длины рассеяния электронов L .

Комментарии

1. Квантовомеханическая задача рассеяния электрона на атоме решается в приближении эффективного радиуса.

2. Потенциал взаимодействия электрона с атомом (или молекулой) состоит из части, описывающей обменные взаимодействия на коротких расстояниях, и поляризационной части, описывающей дальнедействующие силы.

3. Энергия налетающего электрона ε мала в сравнении с характерной энергией связи электронов в атомах: $\varepsilon \ll IP \cdot a_0^2/L^2$ (для атома водорода $\varepsilon \ll R_y \cdot a_0^2/L^2$).

4. Значения длины рассеяния для некоторых атомов и молекул см. введение, [1].

5. Для атомов инертных газов длина рассеяния отрицательна, что позволяет качественно описывать сечение в области минимума, обусловленного эффектом Рамзауэра.

6. В физике газового разряда и низкотемпературной плазмы используется константа скорости упругого столкновения, которая при максвелловской функции распределения электронов по скоростям связана с Ω -интегралом соотношением $K_{\text{упр}} = \langle g_{\text{en}} Q_{\text{en}}^{(1)} \rangle = (16/3) \Omega_{\text{en}}^{(1,1)}$.

7. Для атомов с незамкнутыми электронными оболочками, полярных молекул, молекул с большим квадрупольным моментом следует пользоваться другими моделями потенциалов взаимодействия.

6.2.5. Поляризационный потенциал взаимодействия частиц высоких энергий

Потенциал взаимодействия

$$U(R) = \frac{\alpha e^2}{2R^4}. \quad (6.42)$$

Транспортное сечение упругого столкновения

$$Q_{\text{en}}^{(1)}(\varepsilon) = 2\pi \left(\frac{\alpha e^2}{2\varepsilon} \right)^{1/2}. \quad (6.43)$$

Интеграл столкновений

$$\overline{Q_{\text{en}}^{(1,1)}(T_e)} = \pi^{3/2} \left(\frac{\alpha e^2}{2kT_e} \right)^{1/2}. \quad (6.44)$$

Погрешность

Расчеты с использованием поляризационного потенциала дают оценки $Q_{ij}^{(1)}$ и $\overline{Q_{ij}^{(1,1)}}$ по порядку величины.

Комментарии

1. Значения поляризуемости указаны в [31].
2. При рассмотрении неполярных молекул надо учитывать вклад квадрупольного момента (см. ниже).

6.2.6. Потенциал взаимодействия электрона с квадрупольной молекулой

Потенциал взаимодействия

$$U(R) = \frac{1}{2} \frac{e\Theta}{R^3} (3 \cos^2 \theta_q - 1). \quad (6.45)$$

Транспортное сечение упругого столкновения

$$Q_{\text{en}}^{(1)}(\varepsilon) = \frac{16\pi}{45} \frac{\Theta^2}{e^2 a_0^2}. \quad (6.46)$$

Интеграл столкновений

$$\overline{Q_{\text{en}}^{(1,1)}} = \frac{16\pi}{45} \frac{\Theta^2}{e^2 a_0^2}. \quad (6.47)$$

Обозначения

Θ — квадрупольный момент молекулы

θ_q — угол наклона плоскости квадрупольного момента к оси, соединяющей его центр с электроном.

Погрешность

Значения $Q_{\text{en}}^{(1)}(\varepsilon)$ и $\overline{Q_{\text{en}}^{(1,1)}}(T_e)$, которые рассчитаны по формуле (6.46) при описании рассеяния электрона на полярной молекуле, отличаются от полученных при точных расчетах на 20 %.

Комментарии

1. При вычислении сечения предварительно проводится усреднение по углу θ_q .
2. Вклад квадрупольного взаимодействия в транспортное сечение становится существенным лишь при очень малых значениях энергии относительного движения сталкивающихся частиц (см. введение, [1]).
3. Значения квадрупольных моментов указаны в [31].

6.2.7. Потенциал взаимодействия электрона и молекулы с большим дипольным моментом

Потенциал взаимодействия

$$U(R) = -\frac{eD}{R^2}. \quad (6.48)$$

Транспортное сечение

$$Q_{\text{en}}^{(1)}(\varepsilon) = A/\varepsilon, \quad (6.49)$$

$$\lg A = 0,87 + 2 \lg(2,54D) - [\lg(2,54D)]^2. \quad (6.50)$$

Интеграл столкновений

$$\overline{Q_{\text{en}}^{(1,1)}}(T_e) = 5,8 \cdot 10^3 A/T_e. \quad (6.51)$$

Обозначение

D — дипольный момент молекулы

Комментарии

1. В формуле (6.51) $\overline{Q_{\text{en}}^{(1,1)}}$ — в \AA^2 , T_e — в К.
2. Формулы (6.49)–(6.51) справедливы для столкновений электронов с молекулами, обладающими большим дипольным моментом $D \geq 0,4e a_0$.

6.3. Взаимодействие заряженных частиц

6.3.1. Кулоновский потенциал. Формула Резерфорда

Потенциал взаимодействия

$$U(R) = \frac{Z_i Z_j e^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{R}. \quad (6.52)$$

Зависимость $\chi(b)$

$$\operatorname{tg} \frac{\chi}{2} = \frac{b}{b_0}; \quad b_0 = \frac{|Z_i Z_j| e^2}{4\pi\varepsilon_0 \mu_{ij} g^2}. \quad (6.53)$$

Дифференциальное сечение рассеяния (сечение Резерфорда)

$$\sigma(g, \chi) = \left(\frac{b_0}{2} \right)^2 \frac{1}{\sin^4(\chi/2)}. \quad (6.54)$$

Обозначения

e_i — заряд иона компонента i

$Z_i = e_i/e$ — зарядовое число частицы компонента i с зарядом e_i (для электронов $Z_e = -1$)

Комментарий

Подынтегральные выражения в транспортных сечениях (6.54) для $\ell = 1, 2$ при малых углах рассеяния определяются зависимостью от угла χ^{-4} , поэтому интегралы расходятся на нижнем пределе. По этой причине вместо потенциала (6.52) на практике используется модифицированный кулоновский потенциал с учетом экранирования кулоновских взаимодействий за пределами сферы радиусом, равным радиусу Дебая (см. ниже).

6.3.2. Модифицированный (обрезанный) кулоновский потенциал*Потенциал*

$$U_{ij}(R) = \begin{cases} \frac{Z_i Z_j e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{R}, & R \leq R_D; \\ 0, & R > R_D. \end{cases} \quad (6.55)$$

Радиус Дебая

$$\frac{1}{R_D^2} = \sum_i \frac{n_i Z_i^2 e^2}{\epsilon_0 kT}. \quad (6.56)$$

Транспортные сечения для $\ell = 1, 2$

$$Q_{ij}^{(1)}(g) = 4\pi b_0^2 \ln\left(\frac{R_D}{b_0}\right), \quad Q_{ij}^{(2)}(g) = 8\pi b_0^2 \ln\left(\frac{R_D}{b_0}\right). \quad (6.57)$$

 Ω -интегралы

$$\Omega_{ij}^{(\ell, s)} = \sqrt{\pi} (s-1)! \ell \left(\frac{Z_i Z_j e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{\ln \Lambda}{\mu_{ij}^{1/2} (2kT)^{3/2}}. \quad (6.58)$$

Кулоновский логарифм

$$\Lambda = \frac{12\pi\epsilon_0 kT}{|Z_i Z_j e^2|} R_D. \quad (6.59)$$

Комментарии

1. Минимальный угол рассеяния χ_{\min} соответствует максимальному значению прицельного параметра $b_{\max} = R_D$ и определяется условием

$$\operatorname{tg} \frac{\chi_{\min}}{2} = \frac{b_0}{R_D}.$$

2. Обрезание кулоновского потенциала при $R < R_D$ устраняет расходимость сечения при малых значениях энергии ε и, соответственно, Ω -интегралов при малых значениях температуры.

6.3.3. Дебаевский потенциал. Классическое приближение*Потенциал взаимодействия*

$$U_{ij}(R) = \frac{Z_i Z_j e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{R} \exp\left(-\frac{R}{R_D}\right). \quad (6.60)$$

Транспортные сечения для $\ell = 1, 2$

$$\begin{aligned} Q_{ij}^{(1)}(g) &= 4\pi b_0^2 \left[\ln\left(\frac{R_D}{b_0}\right) - \frac{1}{2} - \gamma \right], \\ Q_{ij}^{(2)}(g) &= 8\pi b_0^2 \left[\ln\left(\frac{R_D}{b_0}\right) - 1 - \gamma \right]. \end{aligned} \quad (6.61)$$

Ω -интегралы

$$\Omega_{ij}^{(1,1)} = \sqrt{\pi} \left(\frac{Z_i Z_j e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{1}{\mu_{ij}^{1/2} (2kT)^{3/2}} \left(\ln \Lambda - \frac{1}{2} - 2\gamma \right), \quad (6.62)$$

$$\Omega_{ij}^{(2,2)} = 2\sqrt{\pi} \left(\frac{Z_i Z_j e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{l}{\mu_{ij}^{1/2} (2kT)^{3/2}} (\ln \Lambda - 1 - 2\gamma). \quad (6.63)$$

где постоянная Эйлера $\gamma = 0,5772$.

Расчетные формулы

В кулоновские сечения и интегралы столкновений через величины R_D и Λ в виде параметров входят концентрация и температура заряженных частиц. Для произвольных значений концентрации электронов n_e интегралы столкновений аппроксимируются формулами [5]

$$\left. \begin{aligned} \overline{Q_{++}^{(1,1)}} &= 0,5228 r_L^2 \ln(1 + 0,6\Lambda) \\ \overline{Q_{++}^{(2,2)}} &= 0,5228 r_L^2 \ln(1 + 0,9\Lambda) \\ \overline{Q_{+-}^{(1,1)}} &= 0,4085 r_L^2 \ln(1 + 2,0\Lambda) \\ \overline{Q_{+-}^{(2,2)}} &= 0,4760 r_L^2 \ln(1 + 1,6\Lambda) \end{aligned} \right\} 1 \leq \Lambda \leq 100, \quad (6.64)$$

$$\left. \begin{aligned} \overline{Q_{--}^{(1,1)}} &= 0,5 r_L^2 [\ln(6\Lambda) - 0,2684] \\ \overline{Q_{--}^{(2,2)}} &= 0,5 r_L^2 [\ln(9\Lambda) + 0,2319] \end{aligned} \right\} \Lambda > 100, \quad (6.65)$$

где

$$r_L^2 = \left(\frac{e^2 Z_1 Z_2}{kT} \right)^2 = 279,1 \left(\frac{Z_1 Z_2}{T[\text{K}]/10^4} \right)^2 (\text{\AA}^2), \quad (6.66)$$

$$\Lambda = \frac{R_D}{r_L} = 4,131 \frac{(T[\text{K}]/10^4)^{3/2}}{|Z_1, Z_2| (n_e[\text{см}^{-3}]/10^{18})^{1/2}}, \quad (6.67)$$

Z_1, Z_2 — зарядовые числа ионов.

Для более высоких значений ℓ и s интегралы столкновений $Q^{(\ell,s)}$ аппроксимируются формулами

$$\omega_{+-}^{(\ell,s)} = \overline{Q_{+-}^{(\ell,s)}} / \overline{Q_{+-}^{(1,1)}}, \quad (6.68)$$

для которых в [5] получены зависимости вида

$$\omega_{+-}^{(\ell,s)} = a - b(\ln \Lambda)^k. \quad (6.69)$$

Параметры a и b приведены в табл. 6.5.

Погрешность

Относительная погрешность расчета по формулам (6.64), (6.65) составляет 1–2 %.

Таблица 6.5. Параметры аппроксимационных формул для $\omega_{+-}^{(\ell,s)}$

ℓ, s		1, 2	1, 3	1, 4	1, 5	2, 3	2, 4	3, 3
$\omega_{+-}^{(\ell,s)}$	a	0,5252	0,3262	0,2262	0,1689	0,6827	0,4960	0,6100
	b	0,0579	0,0523	0,0451	0,0393	0,0022	0,0343	—
	k	0,480	0,458	0,424	0,393	1,354	0,760	—
$\omega_{++}^{(\ell,s)}$	a	0,6109	0,4184	0,3097	0,2422	0,9495	0,7192	0,8712
	b	0,0850	0,0932	0,0880	0,051	0,1168	0,1432	0,0983
	k	0,5506	0,472	0,414	0,3714	0,6744	0,5507	0,6575

Комментарии

1. Значения кулоновского логарифма $\ln \Lambda$ для не слишком разреженной плазмы при высоких температурах удовлетворяют условию $\ln \Lambda \gg 1$. В этом случае использование обрезанного и экранированного кулоновского потенциала приводит к практически одинаковым значениям Ω -интегралов.

2. Классическое вычисление интегралов столкновений $\overline{Q}_{ij}^{(\ell,s)}$ приводит к различающимся на 15 ÷ 30 % значениям для одноименно и разноименно заряженных частиц [5, 32, 33, 34].

3. Расчет квантовомеханическими методами в борновском приближении устраняет расходимость интеграла столкновений $\overline{Q}_{ij}^{(1,1)}$: при $T \rightarrow 0$ интеграл столкновений $\overline{Q}_{ij}^{(1,1)} \rightarrow 4\pi R_D^4/a_0^2$.

6.3.4. Дебаевский потенциал. Борновское приближение

Потенциал взаимодействия

$$U_{ij}(R) = \frac{Z_i Z_j e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{R} \exp\left(-\frac{R}{R_D}\right). \quad (6.70)$$

Дифференциальное сечение рассеяния

$$\sigma = \frac{4R_D^4}{a_0^2 \left(\frac{4m^2 g^2 r_D^2}{\hbar^2} \sin^2 \frac{\chi}{2} + 1 \right)^2}. \quad (6.71)$$

Транспортное сечение рассеяния

$$Q^{(1)} = \frac{2\pi \hbar^4}{a_0^2 m^4 g^4} \left[\ln \left(1 + \frac{4m^2 g^2 R_D^2}{\hbar^2} \right) - \frac{4m^2 g^2 R_D^2}{\hbar^2 \left(\frac{4m^2 g^2 R_D^2}{\hbar^2} + 1 \right)} \right]. \quad (6.72)$$

Комментарии

1. Условие применимости формул (6.71), (6.72) $e^2/\hbar g \ll 1$ [36].

2. Расчет в борновском приближении устраняет расходимость величины транспортного сечения. В предельных случаях больших ($g \rightarrow \infty$)

и малых ($g \rightarrow 0$) скоростей

$$Q^{(1)} = \begin{cases} \approx \frac{1}{g^2}; & g \rightarrow \infty; \\ \pi \left(\frac{4R_D^2}{a_0} \right)^2; & g \rightarrow 0. \end{cases}$$

3. Асимптотическое значение интеграла столкновений при низких температурах $\overline{Q_{ij}^{(1,1)}} \rightarrow \frac{4\pi R_D^4}{a_0^2}$ при $T \rightarrow 0$.

6.4. Интегралы столкновений и Ω -интегралы для столкновений электронов и атомов с атомами и молекулами атмосферных газов

6.4.1. Интегралы $\overline{Q_{ij}^{(1,1)}}$ и $\overline{Q_{ij}^{(2,2)}}$, \AA^2 для столкновений атомов

Определение

Интеграл столкновений

$$\overline{Q_{ij}^{(\ell,s)}} = \int_0^\infty \exp(-\gamma^2) \gamma^{2s+3} Q_{ij}^{(\ell)}(g_{ij}) d\gamma.$$

Интегралы столкновений $\overline{Q_{ij}^{(1,1)}}$ и $\overline{Q_{ij}^{(2,2)}}$ для столкновений атомов O-O, O-N, N-N

Таблица 6.6. Интегралы столкновений атомов O-O, O-N, N-N

T, K	O-O		O-N		N-N	
	$\overline{Q_{ij}^{(1,1)}}$	$\overline{Q_{ij}^{(2,2)}}$	$\overline{Q_{ij}^{(1,1)}}$	$\overline{Q_{ij}^{(2,2)}}$	$\overline{Q_{ij}^{(1,1)}}$	$\overline{Q_{ij}^{(2,2)}}$
1000	5,865	6,883	6,087	7,172	6,338	7,496
1200	5,629	6,623	5,834	6,891	6,066	7,193
1400	5,433	6,406	5,625	6,658	5,841	6,942
1600	5,266	6,221	5,446	6,459	5,650	6,727
1800	5,121	6,060	5,291	6,286	5,483	6,539
2000	4,993	5,918	5,155	6,133	5,337	6,374
2200	4,879	5,790	5,033	5,996	5,206	6,226
2400	4,776	5,674	4,923	5,871	5,086	6,092
2600	4,682	5,569	4,822	5,758	4,981	6,018
2800	4,595	5,472	4,730	5,654	4,882	5,905
3000	4,516	5,383	4,646	5,558	4,792	5,801
4000	4,192	5,017	4,301	5,207	4,423	5,377
5000	3,949	4,778	4,043	4,911	4,147	5,060
6000	3,756	4,557	3,838	4,675	3,929	4,809

Окончание таблицы 6.6.
Интегралы столкновений атомов O–O, O–N, N–N

T, K	O–O		O–N		N–N	
	$\overline{Q^{(1,1)}}$	$\overline{Q^{(2,2)}}$	$\overline{Q^{(1,1)}}$	$\overline{Q^{(2,2)}}$	$\overline{Q^{(1,1)}}$	$\overline{Q^{(2,2)}}$
7000	3,597	4,374	3,669	4,481	3,749	4,601
8000	3,462	4,218	3,525	4,316	3,507	4,425
9000	3,345	4,084	3,402	4,173	3,465	4,273
10 000	3,242	3,965	3,293	4,047	3,349	4,138
11 000	3,151	3,859	3,196	3,935	3,246	4,019
12 000	3,068	3,764	3,108	3,834	3,154	3,912
13 000	2,993	3,676	3,029	3,742	3,070	3,814
14 000	2,925	3,599	2,957	3,658	2,993	3,725
15 000	2,862	3,526	2,890	3,581	2,923	3,642
16 000	2,803	3,458	2,829	3,509	2,858	3,566
17 000	2,749	3,395	2,772	3,443	2,797	3,496
18 000	2,698	3,337	2,718	3,381	2,741	3,430
19 000	2,651	3,281	2,668	3,322	2,688	3,368
20 000	2,606	3,230	2,622	3,268	2,639	3,310

Рекомендуемые значения рассчитаны И. А. Соколовой [5] с использованием потенциала [17].

6.4.2. Ω -интегралы для столкновений электронов с атомами и молекулами

Определение

$$\Omega_{\text{en}}^{(\ell,s)} = \sqrt{\frac{kT_e}{8\pi\mu}} \left(\frac{1}{kT_e} \right)^{s+2} \int_0^\infty \exp\left(-\frac{\varepsilon}{kT_e}\right) \varepsilon^{s+1} Q^{(\ell)}(\varepsilon) d\varepsilon.$$

Интегралы столкновений электрона с атомами и молекулами атмосферных газов N, O, Ar, N₂, O₂, N₂O, H, H₂, H₂O, HO, CO₂, CO

Таблица 6.7. Интегралы $\Omega_{ej}^{(1,1)}(T_e)$, 10^{-9} см³/с

T_e, K	N	O	Ar	N ₂	O ₂	N ₂ O
300	0,62	0,45	0,36	1,39	0,95	5,32
500	0,95	0,72	0,24	2,22	1,41	5,11
700	1,28	0,97	0,18	2,95	1,82	4,93
1000	1,76	1,31	0,16	3,87	2,40	4,79
3000	4,40	3,10	0,68	8,34	5,32	6,90
5000	6,34	4,44	1,68	13,63	7,30	12,08

Окончание таблицы 6.7. Интегралы $\Omega_{ej}^{(1,1)}(T_e)$, 10^{-9} см³/с

T_e , К	N	O	Ar	N ₂	O ₂	N ₂ O
7000	7,90	5,54	2,99	18,56	8,50	16,62
10 000	9,82	6,92	5,35	23,02	9,70	20,54
20 000	14,43	10,33	15,55	26,98	13,53	26,25
30 000	17,61	12,87	25,93	29,33	18,04	32,52
50 000	20,85	15,85	38,04	33,25	24,88	42,88
70 000	20,54	15,98	39,58	32,96	26,43	45,07
100 000	17,22	13,64	33,93	27,98	23,37	39,64

T_e , К	H	H ₂	H ₂ O	OH	CO ₂	CO
300	11,20	2,62	146,94	70,95	17,66	1,70
500	14,21	3,73	113,02	54,99	17,18	2,72
700	16,48	4,74	95,24	46,49	16,28	3,59
1000	19,08	6,13	79,79	38,90	14,64	5,03
3000	26,39	12,88	46,48	22,96	12,33	14,53
5000	28,62	17,43	37,91	19,92	18,13	22,28
7000	29,67	20,69	34,76	19,85	25,75	25,79
10 000	30,14	23,98	33,57	21,16	34,89	27,39
20 000	28,15	28,75	38,31	28,08	43,42	27,86
30 000	25,33	30,32	45,25	33,93	45,10	25,20
50 000	20,61	29,77	53,11	40,66	49,00	17,18
70 000	16,72	26,51	51,88	40,50	48,21	11,36
100 000	12,13	20,57	43,06	34,29	40,90	6,512

Интегралы рассчитаны О. А. Гордеевым, А. Л. Комовым и Е. А. Тимошенко в [5, 35] с использованием сечений [37, 38].

6.4.3. Аппроксимационные формулы для интегралов $\Omega_{en}^{(\ell,s)}$ для столкновений электронов с атомами и молекулами O, N, N₂, O₂ и NO

Определение

Интеграл столкновений по [32]

$$\overline{Q_{ij}^{(\ell,s)}} = \frac{4(\ell+1)}{(s+1)!(2\ell+1-(-1)^\ell)} \frac{1}{2kT_e} \int_0^\infty d\varepsilon \exp\left(-\frac{\varepsilon}{kT_e}\right) \left(\frac{\varepsilon}{kT_e}\right)^{s+1} Q^{(\ell)}(\varepsilon).$$

Комментарии

1. В [32] не делается различий между интегралом столкновений (усредненным сечением) $\overline{Q_{ij}^{(\ell,s)}}$, размерность которого см² (или Å²)

и интегралом $\Omega^{(\ell,s)}$, размерность которого $\text{см}^3/\text{с}$, и который отличается от интеграла столкновений $\Omega^{(\ell,s)}$ множителем $\sqrt{kT_e/2\pi\mu}$, где μ — приведенная масса электрона и атома (молекулы).

2. Диапазон температур составляет 5000–100 000 К.

Расчетная формула

Аппроксимация интегралов столкновений электронов с атомами и молекулами:

$$\overline{Q_{\text{en}}^{(\ell,s)}} = \frac{a_3(\ln T_e)^{a_6} \exp[(\ln T_e - a_1)/a_2]}{\exp[(\ln T_e - a_1)/a_2] + \exp[-(\ln T_e - a_1)/a_2]} + \\ + a_7 \exp\left\{-[(\ln T_e - a_8)/a_9]^2\right\} + a_4[1 + (\ln T_e)^{a_5}].$$

Коэффициенты a_1 – a_9 для указанных атомов и молекул приведены в таблицах 6.8–6.12 по [32].

Таблица 6.8. Коэффициенты a_1 – a_9 , e–N

	a_1	a_2	a_3
$\Omega^{(1,1)}$	8,9279E+00	1,1613E+00	1,6494E+00
$\Omega^{(1,2)}$	8,6314E+00	1,0738E+00	1,8882E+00
$\Omega^{(1,3)}$	8,4009E+00	9,8544E–01	1,9023E+00
$\Omega^{(1,4)}$	8,2043E+00	9,4398E–01	1,8527E+00
$\Omega^{(1,5)}$	8,0388E+00	9,0527E–01	1,8833E+00
$\Omega^{(2,2)}$	8,2257E+00	9,5133E–01	8,7677E–01
	a_4	a_5	a_6
$\Omega^{(1,1)}$	1,2796E–01	2,7394E–01	–2,7594E–01
$\Omega^{(1,2)}$	1,2214E–01	3,3398E–01	–3,4447E–01
$\Omega^{(1,3)}$	1,1026E–01	4,4086E–01	–3,6762E–01
$\Omega^{(1,4)}$	1,0647E–01	4,8117E–01	–3,6661E–01
$\Omega^{(1,5)}$	1,0051E–01	5,4116E–01	–3,8773E–01
$\Omega^{(2,2)}$	6,8519E–02	1,6570E–01	3,4127E–02
	a_7	a_8	a_9
$\Omega^{(1,1)}$	0,0000E+00	0,0000E+00	1,0000E+00
$\Omega^{(1,2)}$	0,0000E+00	0,0000E+00	1,0000E+00
$\Omega^{(1,1)}$	0,0000E+00	0,0000E+00	1,0000E+00
$\Omega^{(1,2)}$	0,0000E+00	0,0000E+00	1,0000E+00
$\Omega^{(1,3)}$	0,0000E+00	0,0000E+00	1,0000E+00
$\Omega^{(1,4)}$	0,0000E+00	0,0000E+00	1,0000E+00
$\Omega^{(1,5)}$	0,0000E+00	0,0000E+00	1,0000E+00
$\Omega^{(2,2)}$	3,5900E–01	9,6380E+00	9,0876E–01

Таблица 6.9. Коэффициенты a_1 – a_9 , e–O

	a_1	a_2	a_3
$\Omega^{(1,1)}$	1,0568E + 1	1,3640E + 00	3,0548E + 04
$\Omega^{(1,2)}$	1,0276E + 01	1,3728E + 00	7,8394E + 04
$\Omega^{(1,3)}$	1,0069E + 01	1,2781E + 00	1,2008E + 05
$\Omega^{(1,4)}$	9,9739E + 00	1,3564 + 00	2,7669E + 05
$\Omega^{(1,5)}$	9,9629E + 00	1,4615E + 00	9,4493E + 05
$\Omega^{(2,2)}$	9,9767E + 00	1,6871E + 00	2,9697E + 05
	a_4	a_5	a_6
$\Omega^{(1,1)}$	2,4439E – 01	1,2512E – 01	–4,2290E + 00
$\Omega^{(1,2)}$	2,2579E – 01	2,0701E – 01	–4,6626E + 00
$\Omega^{(1,3)}$	2,1584E – 01	2,7462E – 01	4,9024E + 00
$\Omega^{(1,4)}$	2,2906E – 01	1,7466E – 01	–5,2350E + 00
$\Omega^{(1,5)}$	1,9454E – 01	2,2494E – 01	–5,7280E + 00
$\Omega^{(2,2)}$	5,6206E – 02	1,4522E – 01	–5,1321E + 00
	a_7	a_8	a_9
$\Omega^{(1,1)}$	2,7943E – 01	8,6407E + 00	1,7624E + 00
$\Omega^{(1,2)}$	2,4241E – 01	8,1977E + 00	1,5622E + 00
$\Omega^{(1,3)}$	2,5935E – 01	8,0276E + 00	1,5527E + 00
$\Omega^{(1,4)}$	2,4244E – 01	7,7435E + 00	1,4870E + 00
$\Omega^{(1,5)}$	1,9924E – 01	7,4822E + 00	1,3722E + 00
$\Omega^{(2,2)}$	7,1705E – 02	8,4309E + 00	1,3830E + 00

Таблица 6.10. Коэффициенты a_1 – a_9 , e–N₂

	a_1	a_2	a_3
$\Omega^{(1,1)}$	4,4673E+00	8,9123E+00	8,6558E+01
$\Omega^{(1,2)}$	6,2997E + 00	2,8243E + 00	6,0373E + 00
$\Omega^{(1,3)}$	6,0853E + 00	2,5330E + 00	9,8515E + 00
$\Omega^{(1,4)}$	5,8136E + 00	2,4462E + 00	9,3499E + 00
$\Omega^{(1,5)}$	5,4329E + 00	2,3732E + 00	6,5229E + 00
$\Omega^{(2,2)}$	7,7099E + 00	3,6418E + 00	6,9892E + 01
	a_4	a_5	a_6
$\Omega^{(1,1)}$	–1,1907E + 01	7,3977E – 01	8,1569E – 02
$\Omega^{(1,2)}$	–6,1715 – 07	5,9733E + 00	–1,3242E – 01
$\Omega^{(1,3)}$	–1,1814E – 10	9,2906E + 00	–4,0522E – 01
$\Omega^{(1,4)}$	–1,1687E – 11	1,0256E + 01	–3,9827E – 01
$\Omega^{(1,5)}$	–5,6704E – 11	9,6931E + 00	–2,4519E – 01
$\Omega^{(2,2)}$	–2,9740E – 01	1,3600E + 00	–7,0673E – 01

Окончание таблицы 6.10.
Коэффициенты a_1 – a_9 , е–N₂

	a_7	a_8	a_9
$\Omega^{(1,1)}$	1,7704E + 00	9,2013E + 00	8,0978E – 01
$\Omega^{(1,2)}$	2,1061E + 00	8,9217E + 00	7,2869E – 01
$\Omega^{(1,3)}$	2,4046E + 00	8,6973E + 00	6,7041E – 01
$\Omega^{(1,4)}$	2,6488E + 00	8,5107E + 00	6,2512E – 01
$\Omega^{(1,5)}$	2,8589E + 00	8,3525E + 00	5,9211E – 01
$\Omega^{(2,2)}$	2,1153E + 00	8,9418E + 00	8,3996E – 01

Т а б л и ц а 6.11. Коэффициент a_1 – a_9 , е–O₂

	a_1	a_2	a_3
$\Omega^{(1,1)}$	8,3307E + 00	2,1057E + 00	1,3703E + 02
$\Omega^{(1,2)}$	8,3440E + 00	2,1878E + 00	2,6005E + 02
$\Omega^{(1,3)}$	8,2363E + 00	2,2106E + 00	3,5049E + 02
$\Omega^{(1,4)}$	7,7713E + 00	2,2180E + 00	8,0242E + 01
$\Omega^{(1,5)}$	8,0580E + 00	2,2437E + 00	4,9008E + 02
$\Omega^{(2,2)}$	8,1575E + 00	2,8053E + 00	9,3652E + 00
	a_4	a_5	a_6
$\Omega^{(1,1)}$	1,6462E – 03	2,2034E + 00	–1,6638E + 00
$\Omega^{(1,2)}$	–4,7740E – 02	–7,8236E – 01	–1,8609E + 00
$\Omega^{(1,3)}$	–1,0523E – 01	–8,9547E – 01	–1,9861E + 00
$\Omega^{(1,4)}$	–2/9025E – 06	4,7426E + 00	–1,3707E + 00
$\Omega^{(1,5)}$	–2,0701E – 01	–1,0225E + 00	–2,1302E + 00
$\Omega^{(2,2)}$	–4,1774E – 04	3,6655E + 00	–1,8979E – 01
	a_7	a_8	a_9
$\Omega^{(1,1)}$	–7,1918E – 01	9,7316E + 00	1,0537E + 00
$\Omega^{(1,2)}$	–9,0948E – 01	9,4672E + 00	1,0447E + 00
$\Omega^{(1,3)}$	–9,7555E – 01	9,2465E + 00	1,0010E + 00
$\Omega^{(1,4)}$	–9,8561E – 01	9,0635E + 00	9,5788E – 01
$\Omega^{(1,5)}$	–1,0577E + 00	8,9127E + 00	9,4543E – 01
$\Omega^{(2,2)}$	–7,6150E – 01	9,3932E + 00	9,6517E – 01

Т а б л и ц а 6.12. Коэффициент a_1 – a_9 , е–NO

	a_1	a_2	a_3
$\Omega^{(1,1)}$	–7,2965E – 01	1,3332E + 01	7,8565E + 02
$\Omega^{(1,2)}$	–1,4887E + 01	1,8148E + 01	2,5286E + 03
$\Omega^{(1,3)}$	–9,5704E + 00	1,7653E + 01	1,4649E + 03

Окончание таблицы 6.12.

Коэффициент a_1 – a_9 , e-NO

	a_1	a_2	a_3
$\Omega^{(1,4)}$	–4,8381E + 00	1,6713E + 01	8,8349E + 02
$\Omega^{(1,5)}$	5,8041E – 01	1,3987E + 01	3,9144E + 02
$\Omega^{(2,2)}$	3,8989E – 02	1,4692E + 01	6,6332E + 02
	a_4	a_5	a_6
$\Omega^{(1,1)}$	–1,9259E + 02	2,8336E – 01	–6,3703E – 02
$\Omega^{(1,2)}$	–1,0586E + 03	2,5251E – 01	9,4782E – 02
$\Omega^{(1,3)}$	–5,5148E + 02	3,6509E – 01	1,4218E – 01
$\Omega^{(1,4)}$	–2,8954E + 02	5,0399E – 01	2,0687E – 01
$\Omega^{(1,5)}$	–9,7881E + 01	7,0323E – 01	2,8223E – 01
$\Omega^{(2,2)}$	–1,6621E + 02	5,9703E – 01	1,9528E – 01
	a_7	a_8	a_9
$\Omega^{(1,1)}$	9,0329E – 01	8,8086E – 00	9,6216E – 01
$\Omega^{(1,2)}$	1,0562E + 00	8,5064E + 00	8,7879E – 01
$\Omega^{(1,3)}$	1,1651E + 00	8,2614E + 00	8,2346E – 01
$\Omega^{(1,4)}$	1,2667E + 00	8,0651E + 00	7,9767E – 01
$\Omega^{(1,5)}$	1,3560E + 00	7,9087E + 00	7,8024E – 01
$\Omega^{(2,2)}$	1,0178E + 00	8,6724E + 00	9,6611E – 01

Коэффициенты в аппроксимационных формулах для Ω -интегралов рассчитаны в [32].

Список литературы к главе 6

1. Гирифельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Г. Молекулярная теория газов и жидкостей. — М.: Изд-во иностр. лит., 1961. — 930 с.
2. Ферцигер Дж., Капер Г. Математическая теория процессов переноса в газах. — М.: Мир, 1976. — 554 с.
3. Чепмен С., Каулинг Т. Математическая теория неоднородных газов. — М.: Изд-во иностр. лит., 1960. — 510 с.
4. Мак-Даниель И., Мэзон Э. Подвижность и диффузия ионов в газах. — М.: Мир, 1976. — 424 с.
5. Гордеев О.А., Калинин А.П., Комов А.Л. и др. Обзоры по теплофизическим свойствам веществ №5(53). — М.: ИВТАН, 1985. — 100 с.
6. Devoto R.S. Electron Transport Properties in High Temperature Air // Phys. Fluids. 1976. V. 19, No. 1. P. 22–24.
7. Герасимов Г.Я., Калинин А.П., Люстерник В.Е. и др. Обзоры по теплофизическим свойствам веществ №5(67). — М.: ИВТАН, 1987. — 157 с.
8. Соколова И.А. Обзоры по теплофизическим свойствам веществ №6(86). — М.: ИВТАН, 1990. — 140 с.

9. Герасимов Г. Я., Жегульская Н. А., Рождественский И. Б. и др. Препринт Института механики МГУ. № 18-96. — М.: Изд-во МГУ, 1996. — 28 с.
10. Monchick L. Collision integrals for the exponential repulsive potential // *Phys. Fluids*. 1959. V. 2, No. 6. P. 695–699.
11. Capitelli M., Gorce C., Longo S. et al. Collision Integrals of High-Temperature Air Species // *J. of Thermophys. and Heat Transfer*. 2000. V. 14, No. 2. P. 259–268.
12. Калинин А. П., Дубровицкий Д. Ю. О возможности использования отталкивательных потенциалов взаимодействия для расчета высокотемпературных интегралов столкновений атомов и молекул // *Теплофиз. выс. температ.* 2000. Т. 38, № 6. С. 882–885.
13. Каплан И. Г. Введение в теорию межмолекулярных взаимодействий. — М.: Наука, 1982. — 312 с.
14. Леонас В. Б. Исследование короткодействующих межмолекулярных сил // *Успехи физ. наук*. 1972. Т. 107, вып. 1. С. 29–56.
15. Foreman P. B., Lees A. B., Pol P. K. Repulsive potentials for the interaction of oxygen atoms with noble gases and atmospheric molecules // *Chem. Phys.* 1976. V. 12. P. 213–224.
16. Леонас В. Б., Самуйлов Е. В. Методы определения потенциалов взаимодействия атомов, молекул, ионов // *Теплофиз. выс. температ.* 1966. Т. 4. С. 716–724.
17. Gaydaenko V. L., Nikulin V. E. Born–Mayer interatomic potentials for atoms with $Z = 2$ to $Z = 36$ // *Chem. Phys. Lett.* 1970. V. 7, No. 3. P. 360–362.
18. Abrahamson A. A. Born–Mayer-type interatomic potential for neutral ground-state atoms with $Z = 2$ to $Z = 105$ // *Phys. Rev.* 1969. V. 178, No. 1. P. 76–79.
19. Capitelli M., Ficocelli V. E. Collision integrals of oxygen atoms in different electronic states // *J. Phys. B*. 1972. V. 5. P. 2066–2073.
20. Higgins L. D., Smith F. J. Collision integrals for high temperature gases // *Mol. Phys.* 1968. V. 14, No. 4. P. 399–400.
21. Соколова И. А., Турский Г. А. Свойства молекулярного переноса диссоциированных и ионизованных смесей газов // *ПМТФ*. 1988. № 3. С. 14–28.
22. Kotani M. // *Proc. Phys.-Math. Soc. Japan*. 1942. V. 24. P. 76–85.
23. Klein M., Smith F. J. Collision integrals for the ($m < 6$) potential function for 10 values of m // *J. Res. NBS*. 1968. V. 72A. P. 359–423.
24. Neufeld P. D., Janzen A. R., Aziz R. A. Empirical Equations to Calculate 16 of the transport Collision Integrals $\Omega^{(\ell,s)*}$ for the Lennard–Jones (12-6) Potential // *J. Chem. Phys.* 1972. V. 57, No. 3. P. 1100–1102.
25. Калашиников А. Н., Фокин Л. Р. Аппроксимация интегралов столкновения $\Omega^{(\ell,s)}$ для потенциалов Леннарда–Джонса $m = 6$ в интервале приведенных температур $T^* = 0,4\text{--}200$ и показателей $m = 8 \div \infty$. Препринт/ИВТАН, № 1-409. — М.: ИВТАН, 1997. — 40 с.
26. Smith F. J., Munn R. J. Automatic calculation of the transport collision integrals with tables for the Morse potential // *J. Chem. Phys.* 1964. V. 41, No. 11. P. 3560–3568.

27. Monchick L., Mason E. A. Transport properties of polar gases // J. Chem. Phys. 1961. V. 35, No. 5. P. 1676–1697.
28. Самуйлов Е. В., Цителаури Н. Н. Интегралы столкновений для потенциала Морзе // Теплофиз. выс. температур. 1964. Т. 2, № 4. С. 565–572.
29. Смирнов Б. М. Атомные столкновения и элементарные процессы в плазме. — М.: Атомиздат, 1968. — 364 с.
30. Храпак А. Г., Якубов И. Т. Электроны в плотных газах и плазме. — М.: Наука, 1981. — 284 с.
31. Радциг А. А., Смирнов Б. М. Справочник по атомной и молекулярной физике. — М.: Атомиздат, 1980. — 240 с.
32. Capitelli M., Gorse C., Longo S. et al. Transport Properties of High Temperature Air Species. AIAA 98-2936. 1998. P. 1–14.
33. Ковальская Г. А., Севастьяненко В. Г., Соколова И. А. Термодинамические свойства воздуха при 12000–25000 К и 0,1–100 атм с учетом снижения потенциала ионизации // ПМТФ. 1972. № 1. С. 15–22.
34. Соколова И. А., Тирский Г. А. Отчет Института механики МГУ. № 2857. — М.: МГУ, 1983. — 116 с.
35. Гордеев О. А., Тимошенко Е. А. Интегралы столкновений электронов с нейтральными компонентами атмосферных газов // Материалы VI Междунар. конф. по неравновесным процессам в соплах и струях (NPNJ-2006). — М.: Вузовская книга, 2006. — С. 131–132.
36. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. — М.: Наука, 1963. — 704 с.
37. Itikawa Y. // Atomic Data and Nuclear Data Tables. 1974. V. 14, No. 1. P. 1–14.
38. Itikawa Y. // Atomic Data and Nuclear Data Tables. 1978. V. 21, No. 1. P. 69–75.

Глава 7

БИБЛИОТЕКА КОЭФФИЦИЕНТОВ ПЕРЕНОСА ДЛЯ РАЗЛИЧНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

В данной главе приведены конкретные выражения для коэффициентов переноса в газах. Вывод этих выражений методом Чепмена–Энскога дан в главах 4 и 5. Указаны параметры модельных потенциалов, описывающих столкновения атомов и молекул. Для ряда модельных потенциалов приведены простые формулы, позволяющие вычислять коэффициенты переноса в конкретных газах. Даны формулы, позволяющие находить сечения упругих столкновений и коэффициенты переноса в смесях газов через соответствующие величины для однокомпонентных газов, из которых состоит смесь. Вклад неупругих столкновений описывается поправкой Эйкена (см. гл. 10). Коэффициенты переноса в ионизованных газах (плазме) приводятся в гл. 12.

7.1. Коэффициент вязкости

7.1.1. Однокомпонентный атомарный газ

Общее математическое выражение

$$\eta = \frac{5kT}{8\Omega^{(2,2)}} f_{\eta} \quad (7.1)$$

или

$$\eta = \frac{5}{16} \frac{(\pi m k T)^{1/2}}{\pi \sigma^2 \Omega^{(2,2)*}(T^*)} f_{\eta}, \quad T^* = \frac{kT}{\varepsilon}.$$

Комментарии

1. Значения Ω -интегралов и приведенных Ω^* -интегралов определяются формулами (6.1) и (6.10).

2. f_{η} — поправка, соответствующая учету более высоких приближений метода Чепмена–Каулинга [1–3]. Формула справедлива для частиц с замкнутыми электронными оболочками. Поправка второго приближения $f_{\eta}^{(2)}$ определяется, в частности, формулой (5.9).

Расчетная формула

$$\eta = 2,6702 \cdot 10^{-6} \frac{\sqrt{\widetilde{MT}}}{\sigma^2 \Omega^{(2,2)*}(T^*)} f_{\eta}. \quad (7.2)$$

Обозначения

η — коэффициент вязкости газа, Па · с

\widetilde{M} — молярная масса, г/моль

T — температура, К

σ — диаметр твердой сферы, Å

T^* — приведенная температура

ε — энергетический параметр потенциала взаимодействия, эрг.

Модель твердых сфер

Математическое выражение

Коэффициент вязкости в первом приближении ($\xi = 1$, $f_{\eta} = 1$)

$$[\eta]_1 = \frac{5}{16} \frac{(\pi m k T)^{1/2}}{\pi \sigma^2}. \quad (7.3)$$

Расчетная формула

$$[\eta]_1 = 2,6702 \cdot 10^{-6} \frac{\sqrt{\widetilde{MT}}}{\sigma^2}. \quad (7.4)$$

Во втором приближении ($\xi = 2$) поправка f_{η} равна 1,015. Учет третьего приближения оказывается практически несущественным.

Полуэмпирическая формула

$$\eta = \eta_0 \left(\frac{T}{T_0} \right)^{1/2}, \quad (7.5)$$

где η_0 — эмпирическое значение коэффициента вязкости при температуре $T_0 = 273$ К.

Комментарии

1. Модель используется для оценочных расчетов. Ω -интегралы в этой модели пропорциональны $T^{1/2}$ (см. формулу (6.9)). Поскольку диаметр твердой сферы σ считается постоянным, то $\eta \sim T^{1/2}$. Значения σ , полученные из сравнения с данными по вязкости некоторых газов, измеренной при $T = 273$ К и $p = 1$ атм, приводятся в табл. 7.1 [2].

Таблица 7.1. Диаметры твердых сфер для ряда частиц

Газ	Ne	Ar	N ₂	O ₂	CH ₄	CO ₂
\widetilde{M} , г/моль	20,179	39,948	28,013	31,999	16,043	44,010
σ , Å	2,58	3,64	3,75	3,61	4,14	4,63

2. В табл. 7.1 наряду с атомарными газами рассматриваются и молекулярные. При расчетах коэффициента вязкости газов из двух- и многоатомных молекул использование выражений, справедливых для атомарных газов, как показывает анализ расчетных и экспериментальных данных, оказывается вполне допустимым.

Модель Рэлея

Полуэмпирическая формула

$$\eta = \eta_0 \left(\frac{T}{T_0} \right)^n. \quad (7.6)$$

Параметры модели

η_0 — эмпирическое значение коэффициента вязкости газа при температуре $T_0 = 273$ К

n — показатель степени в выражении (7.6) для коэффициента вязкости.

Комментарии

1. Модель Рэлея соответствует использованию сечений столкновений, полученных для потенциала взаимодействия точечного центра отталкивания, что приводит к значению (см. п. 6.1.2)

$$n = \frac{1}{2} + \frac{2}{\nu},$$

где ν — показатель степенной зависимости в потенциале отталкивания. При $\nu \rightarrow \infty$ зависимость коэффициента вязкости от температуры соответствует модели твердых сфер ($\eta \sim T^{1/2}$). Для $\nu = 4$ (модель максвелловских молекул) $\eta \sim T$, что противоречит опытным данным.

2. Параметр n подбирается эмпирически из сравнения с экспериментом в заданном интервале температур.

Модель Сюзерленда

Математическое выражение

$$[\eta]_1 = \frac{5}{16} \frac{(\pi m k T)^{1/2}}{\pi \sigma^2} \frac{1}{1 + (S/T)}. \quad (7.7)$$

Расчетная формула

$$[\eta]_1 = 2,6702 \cdot 10^{-6} \frac{\sqrt{MT}}{\sigma^2} \frac{1}{1 + (S/T)}. \quad (7.8)$$

Полуэмпирическая формула

$$\eta = \eta_0 \left(\frac{T}{T_0} \right)^{3/2} \frac{T_0 + S}{T + S}. \quad (7.9)$$

Параметры модели

σ — параметр потенциала взаимодействия

S — постоянная Сюзерленда (см. формулы (6.23))

η_0 — эмпирическое значение коэффициента вязкости при $T = T_0$.

Комментарии

1. Параметры σ и S или η_0 и S определяются из сравнения с экспериментом в определенном интервале температур.

2. Модель удобна для вычислений и дает близкие к реальным зависимости значения коэффициента вязкости от температуры в области умеренных температур газа особенно при $\nu = 6$, что соответствует значению $S = 0,1736(\varepsilon/k)$ (см. п. 6.1.4).

3. При высоких температурах ($T \gg S$) формула, даваемая моделью Сюзерленда, переходит в формулу, полученную для модели твердых сфер.

Потенциал Ленарда–Джонса

Используются общие математическая и расчетная формулы, даваемые выражениями (7.1) и (7.2).

Комментарии

1. Параметры потенциала (силовые постоянные) σ и ε/k (см. п. 6.1.5 и введение [1]) определяются из сравнения с экспериментами по термодинамическим и транспортным свойствам газов в определенном диапазоне температур. Значения этих параметров для ряда газов приводятся в табл. 7.2 [4]. Помимо коэффициента вязкости эти параметры могут быть использованы и для расчетов других коэффициентов переноса.

2. Зависимости $\Omega^{(2,2)*}(T^*)$ от приведенной температуры $T^* = kT/\varepsilon$, рассчитанные для потенциала Ленарда–Джонса, приводятся в п. 6.1.5.

3. Поправка f_η дает вклад в коэффициент вязкости не более 0,5 % и в расчетах по этой модели, как правило, не учитывается.

Двухпараметрическая модель, основанная на принципе соответственных состояний

Применяются общие математическая и расчетная формулы, даваемые выражениями (7.1) и (7.2) с использованием универсального корреляционного соотношения вида [4]

$$\frac{\Omega^{(2,2)*}}{f_\eta} = \exp [0,46649 - 0,57015 \ln T^* + 0,19164(\ln T^*)^2 + 0,03708(\ln T^*)^3 + 0,00241(\ln T^*)^4] \quad (1 \leq T^* \leq 25). \quad (7.10)$$

Значения параметров σ и ε/k для ряда газов указаны в табл. 7.2.

Комментарий

Использование принципа соответственных состояний основано на том факте, что для любого двухпараметрического потенциала, как это

Таблица 7.2. Параметры потенциала Ленарда–Джонса для различных молекул

Газ	M , г/моль	σ , Å	ε/k , К	Газ	M , г/моль	σ , Å	ε/k , К
N ₂	28,0134	3,652	98,4	SF ₆	146,054	5,252	207,7
O ₂	31,999	3,407	121,1	C ₂ H ₄	28,0542	4,071	244,3
NO	30,0061	3,474	125,0	C ₂ H ₆	30,0701	4,371	241,9
CO	28,0106	3,652	98,4	He	4,0026	2,610	10,40
CO ₂	44,0100	3,769	245,3	Ne	20,179	2,755	42,00
N ₂ O	44,0128	3,703	266,8	Ar	39,948	3,350	141,5
CH ₄	16,0430	3,721	161,4	Kr	83,80	3,571	97,8
CF ₄	88,0048	4,579	156,5	Xe	131,29	3,885	274,0

Примечание. Для Ar, Kr и Xe приведены параметры «истинного» потенциала, а не потенциала Ленарда–Джонса.

следует из общего выражения для коэффициента вязкости (7.1), величина $(5/16)(\pi m k T)^{1/2} \sigma^{-2} \eta^{-1} = \Omega^{(2,2)*} / f_\eta$ оказывается универсальной функцией приведенной температуры $T^* = kT/\varepsilon$. Соотношение (7.10) является эмпирическим, полученным в результате обработки экспериментальных данных по коэффициенту вязкости ряда атомарных (инертных) газов [4]. Сравнение с экспериментальными данными по коэффициентам вязкости других газов (в том числе некоторых неполярных молекулярных газов) показывает, что расчеты по корреляционному соотношению (7.10) также дают сходные результаты. Экстраполяция соотношения (7.10) за пределы указанного интервала значений T^* может привести к заметным погрешностям расчета.

Погрешность корреляции для $\Omega^{(2,2)*}$ составляет 0,5 %. В пределах этой погрешности можно полагать $f_\eta = 1$ [4].

Обобщенная модель, основанная на принципе соответственных состояний

Применяются общие математическая и расчетная формулы (7.1) и (7.2). Поправка f_η полагается равной единице. Поскольку двухпараметрические модели потенциалов взаимодействия не обеспечивают адекватного представления корреляционных функций в области дальнего действия, используются 5-параметрические корреляционные соотношения вида [4]:

$$\Omega^{(2,2)*} = \exp [0,46641 - 0,56991 (\ln T^*) + 0,19591 (\ln T^*)^2 + 0,03879 (\ln T^*)^3 + 0,00259 (\ln T^*)^4]; \quad 1,2 \leq T^* \leq 10, \quad (7.11)$$

$$\Omega^{(2,2)*} = (\rho^*)^2 \xi^2 [1,04 + a_2 (\ln T^*)^{-2} + a_3 (\ln T^*)^{-3} + a_4 (\ln T^*)^{-4}], \quad T^* > 10, \quad (7.12)$$

где $\xi = \ln(A/kT) = \ln(U_0^*/T^*)$; коэффициенты a_i имеют вид

$$a_i = a_{i1} + (-1)^i (\xi_{10} \rho^*)^{-2} \left(a_{i2} + \frac{a_{i3}}{\alpha_{10}} + \frac{a_{i4}}{\alpha_{10}} \right), \quad \xi_{10} = \ln \left(\frac{U_0^*}{10} \right). \quad (7.13)$$

Комментарии

1. Рассматриваемая модель основывается на обобщенном принципе соответственных состояний, использующем представление потенциальной энергии взаимодействия молекул в форме

$$U(R) = \varepsilon \Phi \left(\frac{R}{\sigma, C_6^*, U_0^*, \rho^*} \right), \quad (7.14)$$

что приводит к представлению приведенных интегралов столкновений в виде $\Omega^{(2,2)*}(T^*, C_6^*, U_0^*, \rho^*)$. В универсальном потенциале взаимодействия (7.14) используются параметры потенциалов Борна–Майера, Ленарда–Джонса и Ван-дер-Ваальса.

2. Короткодействующая часть потенциала (7.14), соответствующая отталкиванию, описывается моделью Борна–Майера (см. гл. 6):

$$U(R) = A \exp(-\beta R). \quad (7.15)$$

В формуле (7.14) $U_0^* = A/\varepsilon$ и $\rho^* = \rho/\sigma = 1/\beta\sigma$.

3. В выражении (7.14) также используются параметры потенциала Ленарда–Джонса ε и σ (см. (6.24)):

$$U(R) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{R} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R} \right)^6 \right]. \quad (7.16)$$

4. Предполагается, что дальнодействующая часть потенциала, соответствующая ветви притяжения, описывается выражением

$$U(R) = -\frac{C_6}{R^6}, \quad (7.17)$$

так что $C_6^* = C_6/\varepsilon\sigma^6$. Диапазон сравнительно низких температур, соответствующих интервалу $0 < T^* \leq 1,2$, где необходимо дополнительно использовать параметр C_6^* , здесь не рассматривается.

Таблица 7.3. Параметры ρ^* и U_0^* для различных газов

Газ	ρ^*	U_0^*	Газ	ρ^*	U_0^*	Газ	ρ^*	U_0^*
N ₂	0,1080	5,308	N ₂ O	0,0730	2,600	Ne	0,0784	11,09
O ₂	0,0745	1,322	CH ₄	0,0698	3,066	Ar	0,0836	5,117
NO	0,0883	2,145	CF ₄	0,0200	1,460	Kr	0,0831	4,491
CO	0,1080	5,308	SF ₆	0,0500	4,067	Xe	0,0854	3,898
CO ₂	0,0720	2,800	He	0,0797	8,50			

Таблица 7.4. Коэффициенты
в корреляционной формуле (7.13) для $\Omega^{(2,2)*}$

i	a_{i1}	a_{i2}	a_{i3}	a_{i4}
2	-33,0838	20,0862	72,1059	8,27648
3	101,571	56,4472	286,393	17,7610
4	-87,7036	46,3130	277,146	19,0573

5. Значения σ и ϵ для различных газов указаны в табл. 7.2. Значения параметров U_0^* и ρ^* для тех же газов приводятся в табл. 7.3. Численные значения коэффициентов a_{i1} в формуле (7.13) даны в табл. 7.4.

7.1.2. Однокомпонентный молекулярный газ

Математическое выражение

$$\eta = \frac{5kT}{8\Omega_\eta} f_\eta, \quad (7.18)$$

где интеграл Ω_η дается выражением (5.24).

Модель шероховатых сфер

Математическое выражение

Коэффициент вязкости в первом приближении ($f_\eta = 1$)

$$[\eta]_1 = \frac{15}{8} \frac{(\pi m k T)^{1/2}}{\pi \sigma^2} \frac{(K+1)^2}{13K+6}. \quad (7.19)$$

Определение

Безразмерный момент инерции

$$K = 4I_a / m\sigma^2. \quad (7.20)$$

Комментарии

1. Модель шероховатых сфер относится к классическим моделям, в которых молекулы взаимодействуют при столкновении как твердые упругие тела. В этой модели молекулы представляют собой непроницаемые сферы диаметром σ и массой m с моментом инерции I_a . Динамические соотношения, описывающие взаимодействия шероховатых сфер, предполагают, что при упругом соударении относительная скорость сфер в точке их соприкосновения меняется на обратную [1, 5].

2. Момент инерции молекулы I_a определяется расположением массы молекулы относительно ее центра масс. Значения K меняются от нуля, когда вся масса молекулы сосредоточена в ее центре, до максимального значения $2/3$, когда масса равномерно распределена по поверхности сферы. При малых значениях K

$$[\eta]_1 = \eta \left(1 - \frac{1}{6} K \right).$$

При $K = 2/3$ отличие значений $[\eta]_1$ от η , даваемого формулой (7.1), составляет 13,6 %.

3. По сравнению с другими классическими моделями (нагруженные сферы, сфероцилиндры и др. [5]) в модели шероховатых сфер наиболее заметно выражена основная особенность неупругого взаимодействия — переход энергии поступательного движения молекулы в энергию ее вращательного движения. Расчеты по этой модели дают верхнюю оценку влияния неупругих столкновений на коэффициенты переноса.

Модель Мейсона–Мончика

Математическое выражение

$$[\eta]_1 = \frac{\eta}{\left[1 + \frac{16}{15\pi} \frac{1}{Z} \left(m \frac{c_{\text{int}}}{k}\right) \left(1 - \frac{3}{2} \langle \sin^2 \chi \rangle\right)\right]}. \quad (7.21)$$

Определения

Удельная теплоемкость, соответствующая внутренним степеням свободы молекул

$$c_{\text{int}} = c_V - \frac{3}{2} \frac{k}{m} = c_V - \frac{3}{2} \frac{R}{M}. \quad (7.22)$$

Характерное отношение времен неупругих и упругих столкновений, или *фактор* Z

$$Z = \frac{4}{\pi} \frac{\tau_E}{\tau_\eta} = \frac{4}{\pi} \frac{p\tau_E}{\eta}. \quad (7.23)$$

Комментарии

1. Модель Мейсона–Мончика предложена в [6–8].
2. Модели, используемые для расчета фактора Z , рассматриваются ниже (см. также введение, [1, 2]).
3. Обозначение $\langle \sin^2 \chi \rangle$ соответствует усредненному по ориентациям молекулы значению $\sin^2 \chi$ [5]. Для изотропного рассеяния $\langle \sin^2 \chi \rangle = 2/3$ и $[\eta]_1 = \eta$, где η определено выражением (7.3).

7.1.3. Смеси атомарных и молекулярных газов

Общие соотношения

Коэффициент вязкости многокомпонентной смеси атомарных газов в первом приближении вычисляется с помощью выражения (5.42), представляющего отношение определителя порядка $N + 1$ к определителю порядка N , где N — число компонентов смеси. Для вычисления элементов определителей H_{ii}^{00} и H_{ij}^{00} ($i \neq j$) (см. выражения (5.43)) необходимо рассчитывать величины $[\eta_{ii}]_1$, $[\eta_{ij}]_1$ и A_{ij}^* . Коэффициенты

$[\eta_{ii}]_1$ для каждого из компонентов смеси рассчитываются по формуле

$$[\eta_{ii}]_1 = \frac{5}{16} \frac{(\pi m_i kT)^{1/2}}{\pi \sigma_{ii}^2 \Omega_{ii}^{(2,2)*}(T_i^*)}; \quad T_i^* = \frac{kT}{\varepsilon_i}. \quad (7.24)$$

Коэффициенты $[\eta_{ij}]_1$ рассчитываются по формуле

$$[\eta_{ij}]_1 = \frac{5}{16} \frac{(2\pi \mu_{ij} kT)^{1/2}}{\pi \sigma_{ij}^2 \Omega_{ij}^{(2,2)*}(T_{ij}^*)}; \quad T_{ij}^* = \frac{kT}{\varepsilon_{ij}}. \quad (7.25)$$

Коэффициент A_{ij}^* определяется соотношением

$$A_{ij}^* = \frac{\Omega_{ij}^{(2,2)*}(T_{ij}^*)}{\Omega_{ij}^{(1,1)*}(T_{ij}^*)}. \quad (7.26)$$

Остальные определения см. в гл. 5.

Модель твердых сфер

При вычислении параметров $[\eta_{ii}]_1$ и $[\eta_{ij}]_1$ используются условия

$$\sigma_{ii} = \frac{\sigma_{ii} + \sigma_{jj}}{2}; \quad \Omega_{ii}^{(2,2)*} = \Omega_{ij}^{(2,2)*} = 1. \quad (7.27)$$

При этом $A_{ij}^* = 1$.

Потенциал Ленарда–Джонса

Используются комбинационные правила

$$\sigma_{ij} = \frac{\sigma_{ii} + \sigma_{jj}}{2}, \quad \varepsilon_{ij} = \sqrt{\varepsilon_{ii} \varepsilon_{jj}}. \quad (7.28)$$

Значения $\Omega_{ij}^{(2,2)*}(T^*)$ и $A_{ij}^*(T^*)$ как функций T^* для потенциала Ленарда–Джонса приводятся в [2]. В гл. 6 приведены аппроксимирующие формулы для их вычисления (см. также цитированную там литературу).

Модель, основанная на принципе соответственных состояний

Коэффициент вязкости смеси рассчитывается на основе выражения (5.42). При вычислении параметров $[\eta_{ii}]_1$ и $[\eta_{ij}]_1$ используются корреляционные соотношения (7.10), справедливые для двухпараметрической модели, и комбинационные правила (7.28). Для определения A_{ij}^* применяется корреляционная формула вида [4]

$$A_{ij}^* = \exp [0,1281 - 0,1108 \ln T^* + 0,0962 (\ln T^*)^2 - 0,027 (\ln T^*)^3 + 0,0024 (\ln T^*)^4]; \quad 1 \leq T^* \leq 25. \quad (7.29)$$

Применяемые формулы справедливы для смесей как атомарных, так и для молекулярных газов в диапазоне температур, определяемом условием $1 \leq T^* \leq 25$.

Модель, использующая экспериментальные значения параметров смеси

Для газовых смесей как атомов, так и молекул удовлетворительные результаты для коэффициента вязкости смеси дают расчеты по формулам (5.42) и (5.43) с использованием коэффициентов H_{ii}^{00} и H_{ij}^{00} , в которых вместо $[\eta_{ii}]_1$ используются экспериментально определяемые значения коэффициента вязкости компонентов смеси η_i , а вместо $[\eta_{ij}]_1$ используется выражение

$$\eta_{ij} = \frac{5}{3} \mu_{ij} \frac{n \mathcal{D}_{ij}}{A_{ij}^*}, \quad (7.30)$$

в которое подставляются экспериментальные значения коэффициентов бинарной диффузии \mathcal{D}_{ij} . При этом значения A_{ij}^* рассчитываются по формулам, полученным с помощью модели Ленарда–Джонса или формулы (7.29).

7.1.4. Приближенные и полуэмпирические выражения для коэффициента вязкости смеси

Расчетные формулы

Формула Брокау

$$[\eta]_1 = \sum_{i=1}^N \frac{[\eta_{ii}]_1}{1 + \sum_{j \neq i}^N \frac{x_j}{x_i} \Phi_{ij}}; \quad \Phi_{ij} = \frac{6}{5} A_{ij}^* \frac{RT}{p \widetilde{M}_i} \frac{[\eta_{ii}]_1}{[\mathcal{D}_{ij}]_1}. \quad (7.31)$$

Формула Бадденберга–Уилки

$$\eta = \sum_{i=1}^N \frac{\eta_i}{1 + 1,385 \frac{RT}{p \widetilde{M}_i} \sum_{j \neq i}^N \frac{x_j}{x_i} \frac{\eta_i}{\mathcal{D}_{ij}}}. \quad (7.32)$$

Формула Уилки

$$\eta = \sum_{i=1}^N \frac{\eta_i}{1 + \sum_{j \neq i}^N \frac{x_j}{x_i} \left[\frac{\widetilde{M}_j}{8(\widetilde{M}_i + \widetilde{M}_j)} \right]^{1/2} \left[1 + \left(\frac{\eta_i}{\eta_j} \right)^{1/2} \left(\frac{\widetilde{M}_j}{\widetilde{M}_i} \right)^{1/4} \right]^2}. \quad (7.33)$$

Формула Армали–Саттона

$$\eta = \sum_{i=1}^N \frac{\eta_i}{1 + \sum_{j \neq i}^N \frac{x_j}{x_i} \frac{(5/3 A_{ij}^*) \widetilde{M}_i + \widetilde{M}_j}{\widetilde{M}_i + \widetilde{M}_j} \varphi_{ij}}, \quad (7.34)$$

где

$$\varphi_{ij} = \frac{\left[F_{ij} + \left(\frac{\eta_i}{\eta_j} \right)^{1/2} \left(\frac{\widetilde{M}_j}{\widetilde{M}_i} \right)^{1/4} B_{ij} \right]^2}{2\sqrt{2} \left(1 + \frac{\widetilde{M}_i}{\widetilde{M}_j} \right)^{1/2}}. \quad (7.35)$$

Обозначения

$[\eta_{ij}]_1$ — коэффициент вязкости атомарного газа компонента i (первое приближение теории Чепмена–Каулинга)

$[\mathcal{D}_{ij}]_1$ — коэффициент диффузии бинарной смеси компонентов i и j (первое приближение теории Чепмена–Каулинга)

η_i — экспериментальное значение коэффициента вязкости газа, состоящего из частиц компонента i

\mathcal{D}_{ij} — экспериментальное значение коэффициента диффузии бинарной смеси частиц компонентов i и j

Комментарии

1. При изложении п. 7.1.4. использованы рекомендации работы [8].

2. Формула Брокау (7.31) получена в результате разложения определителей в выражении для $[\eta]_1$ (5.42) в бесконечный ряд с аппроксимацией первым членом ряда и использованием малости недиагональных коэффициентов H^{pq} по сравнению с диагональными.

3. Коэффициент 1,385 в формуле Бадденбурга–Уилки (7.32) получен усреднением результатов сравнения теоретических и экспериментальных значений коэффициентов вязкости ряда газовых смесей для различных концентраций компонент при атмосферном давлении и в интервале температур $T = 300\text{--}500$ К при использовании экспериментальных значений коэффициентов вязкости однокомпонентных газов η_i и коэффициентов диффузии бинарных смесей \mathcal{D}_{ij} .

4. Формула Уилки (7.33) получена с использованием выражений типа (7.31) и приближенных правил комбинирования, позволяющих выразить коэффициент диффузии бинарной смеси через молярные массы и коэффициенты вязкости ее компонентов.

5. Эмпирические параметры B_{ij} , F_{ij} в формулах Армали–Саттона (7.34), (7.35) подбираются исходя из наилучшего совпадения с экспериментом в широком интервале температур и концентраций компонентов смеси.

7.2. Коэффициент объемной вязкости

Математическое выражение

$$\varsigma = \frac{k c^{\text{int}}}{m c_V^2} p \tau_E f_{\varsigma}; \quad c^{\text{int}} = c_V - \frac{3}{2} \frac{k}{m}. \quad (7.36)$$

Фактор Z

Характерное отношение времен релаксации энергии при неупругих и упругих столкновений

$$Z = \frac{4}{\pi} \frac{\tau_E}{\tau_\eta} = \frac{4}{\pi} \frac{p\tau_E}{\eta}. \quad (7.37)$$

Характерные времена τ_η и τ_E определены выражениями (5.25) и (5.27).

Модель шероховатых сфер

Коэффициент объемной вязкости в первом приближении ($\xi = 1$)

$$[\varsigma]_1 = \left(\frac{mkT}{\pi} \right)^{1/2} \frac{1}{\sigma^2} \frac{(1+K)^2}{32K^2}, \quad (7.38)$$

$$Z = \frac{12}{5\pi} \frac{(1+K)^2}{K}. \quad (7.39)$$

Комментарии

1. Наименьшее значение фактора Z при $K = 2/3$ составляет 2,8.
2. В модели Паркера [9] фактор Z определяется формулой

$$Z^{\text{rot}} = Z_\infty^{\text{rot}} \left[1 + \frac{\pi^{3/2}}{2} \left(\frac{T^*}{T} \right)^{1/2} + \left(\frac{\pi^2}{4} + 2 \right) \left(\frac{T^*}{T} \right) \right]^{-1}. \quad (7.40)$$

3. В модели Брау–Джонсмана [10] фактор Z равен

$$Z^{\text{rot}} = Z_\infty^{\text{rot}} \left[1 + \frac{\pi^{3/2}}{2} \left(\frac{T^*}{T} \right)^{1/2} + \left(\frac{\pi^2}{4} + 2 \right) \left(\frac{T^*}{T} \right) + \pi^{3/2} \left(\frac{T^*}{T} \right)^{3/2} \right]^{-1}. \quad (7.41)$$

4. В качестве модели межмолекулярного взаимодействия при получении выражений (7.38), (7.39) и (7.40), (7.41) используется модифицированный потенциал Морзе [11]. При этом $T^* = \varepsilon/k$, а параметр Z_∞^{rot} определяется эмпирически из сравнения теоретических и экспериментальных значений Z^{rot} при определенной температуре.

7.3. Коэффициент диффузии бинарной смеси и коэффициент самодиффузии

7.3.1. Коэффициент диффузии бинарной смеси

Общее математическое выражение

$$\mathcal{D}_{ij} = \frac{3kT}{16n\mu_{ij} \Omega_{ij}^{(1,1)}} f_{ij}^D \quad (7.42)$$

или

$$\mathcal{D}_{ij} = \frac{3}{16n} \left[\frac{2\pi kT}{\mu_{ij}} \right]^{1/2} \frac{1}{\pi \sigma_{ij}^2 \Omega_{ij}^{(1,1)*}(T_{ij}^*)} f_{ij}^D. \quad (7.42a)$$

Расчетная формула

$$\mathcal{D}_{ij} = 0,0026280 \left[\frac{(\widetilde{M}_i + \widetilde{M}_j) T^3}{2 \widetilde{M}_i \widetilde{M}_j} \right]^{1/2} \frac{1}{p \sigma_{ij}^2 \Omega_{ij}^{(1,1)*}(T_{ij}^*)} f_{ij}^D. \quad (7.43)$$

Обозначения

\mathcal{D}_{ij} — коэффициент диффузии бинарной смеси частиц компонентов i и j , $\text{см}^2/\text{с}$

f_{ij}^D — поправка к коэффициенту диффузии и самодиффузии

p — давление, атм

n — концентрация молекул, см^{-3}

$T_{ij}^* = kT/\varepsilon_{ij}$ — приведенная температура, К

\widetilde{M}_i и \widetilde{M}_j — молярные массы компонентов, г/моль

σ_{ij} и ε_{ij}/k — параметры потенциала взаимодействия частиц разных компонентов, Å и К соответственно.

Комментарии

1. Коэффициент диффузии бинарной смеси в первом приближении $[\mathcal{D}_{ij}]_1$ определяется формулами (7.42)–(7.43) при $f_{ij}^D(1) = 1$.

2. Формула (7.43) справедлива для двухпараметрических потенциалов взаимодействия.

3. Поправка второго приближения записывается в виде

$$f_{ij}^D(2) = (1 - \Delta_{ij})^{-1}.$$

Для бинарной смеси Δ_{12} определяется формулой (5.87).

Полуэмпирическая формула поправки f_{12}^D (7.2) для бинарной смеси [4]

$$f_{12}^D = 1 + 1,3(6C_{12}^* - 1)^2 \frac{ax_1}{1 + bx_1}; \quad a = 1 + \frac{2^{1/2}}{8A_{12}^* [1 + 1,8(m_2/m_1)]^2}, \quad (7.44)$$

$$b = 10a \left[1 + 1,8 \left(\frac{m_2}{m_1} \right) + 3 \left(\frac{m_2}{m_1} \right)^2 \right] - 1,$$

x_1 — относительная концентрация атомов (молекул) компонента с индексом 1.

Модель твердых сфер

Коэффициент диффузии бинарной смеси вычисляется на основе выражений (7.42)–(7.43), в которых используются параметры

$$\sigma_{ij} = \frac{\sigma_{ii} + \sigma_{jj}}{2}; \quad \Omega_{ij}^{(1,1)*} = 1; \quad A_{12}^* = C_{12}^* = 1.$$

Потенциал Ленарда–Джонса

При вычислении \mathcal{D}_{ij} используются комбинационные правила

$$\sigma_{ij} = \frac{\sigma_{ii} + \sigma_{jj}}{2}; \quad \varepsilon_{ij} = \sqrt{\varepsilon_{ii} \varepsilon_{jj}}; \quad T_{ij}^* = \frac{kT}{\varepsilon_{ij}}. \quad (7.45)$$

Значения $\Omega_{ij}^{(1,1)*}(T^*)$, A_{ij}^* и C_{ij}^* как функций T_{ij}^* для потенциала Ленарда–Джонса приводятся в [2]. Аппроксимирующие формулы для их вычисления приведены в гл. 6.

7.3.2. Коэффициент самодиффузии в бинарной смеси

Математическое выражение

$$\mathcal{D}_{11} = \frac{3}{8n} \left[\frac{\pi kT}{m} \right]^{1/2} \frac{1}{\pi \sigma^2 \Omega^{(1,1)*}(T^*)} f^D \quad (7.46)$$

или

$$\mathcal{D}_{11} = 0,0026280 \left[\frac{T}{M} \right]^{1/2} \frac{1}{p \sigma^2 \Omega^{(1,1)*}(T^*)} f^D. \quad (7.46a)$$

Комментарий

Коэффициент самодиффузии в первом приближении в атомарном газе связан с коэффициентом вязкости в первом приближении соотношением

$$\frac{\rho[\mathcal{D}_{11}]_1}{[\eta]_1} = \frac{6}{5} A_{ij}^*. \quad (7.47)$$

Коэффициент диффузии во втором приближении

$$[\mathcal{D}_{11}]_2 = [\mathcal{D}_{11}]_1 f^D(2); \quad f^D(2) = \left[1 - \frac{(6C_{ij}^* - 5)^2}{55 - 12B_{ij}^* + 16A_{ij}^*} \right]. \quad (7.48)$$

Модель твердых сфер

Используются выражения (7.46), (7.46a), в которых

$$\Omega^{(1,1)*} = 1; \quad A_{ij}^* = B_{ij}^* = C_{ij}^*; \quad f^D(2) = 1,017.$$

Модель, основанная на принципе соответственных состояний

Используется выражение (7.46) с учетом корреляционного соотношения вида [4]

$$\frac{\Omega^{(1,1)*}}{f^D} = \exp [0,348 - 0,459 \ln T^* + 0,095 (\ln T^*)^2 - 0,010 (\ln T^*)^3], \quad (1 \leq T^* \leq 25). \quad (7.49)$$

Комментарии

1. Выражение (7.49) можно использовать для определения коэффициентов диффузии бинарной смеси в первом приближении $[\mathcal{D}_{ij}]_1$ на основе выражения (7.42), применяя комбинационные правила (7.45).

2. Относительная погрешность корреляционной формулы для $\Omega^{(1,1)*}$ составляет 2 %. В пределах этой погрешности $f^D = 1$.

7.4. Коэффициент теплопроводности и фактор Эйнена

7.4.1. Однокомпонентный атомарный газ

Общее математическое выражение

$$\lambda = \frac{25 kT}{16 \Omega^{(2,2)}} c_V f_\lambda; \quad c_V = \frac{3}{2} \frac{k}{m} = \frac{3}{2} \frac{R}{M} \quad (7.50)$$

или

$$\lambda = \frac{25}{32} \frac{(\pi m k T)^{1/2}}{\pi \sigma^2 \Omega^{(2,2)*}(T^*)} c_V f_\lambda; \quad T^* = \frac{kT}{\varepsilon}. \quad (7.51)$$

Значения Ω -интегралов и приведенных Ω^* -интегралов определяются формулами (6.1) и (6.10), f_λ — поправка, соответствующая учету более высоких приближений метода Чепмена–Каулинга [1–3]. Поправка второго приближения $f_\lambda^{(2)}$ определяется формулой (5.19).

Расчетная формула

$$\lambda = 0,083250 \frac{\sqrt{T/\widetilde{M}}}{\sigma^2 \Omega^{(2,2)*}(T^*)} f_\lambda. \quad (7.52)$$

Обозначения

λ — истинный коэффициент теплопроводности газа, Вт/К·м

f_λ — поправка к коэффициенту теплопроводности

M — молярная масса, г/моль

T — температура, К

T^* — приведенная температура, К

ε — параметр потенциала взаимодействия, эрг

Комментарий

Коэффициент теплопроводности в первом приближении $[\lambda]_1$ связан с коэффициентом вязкости в первом приближении $[\eta]_1$ соотношением

$$[\lambda]_1 = \frac{15}{4} \frac{k}{m} [\eta]_1 = \frac{15}{4} \frac{R}{M} [\eta]_1. \quad (7.53)$$

Модель твердых сфер

Математическое выражение

$$[\lambda]_1 = \frac{75}{64} k \frac{(\pi k T / m)^{1/2}}{\pi \sigma^2} \quad (7.54)$$

или

$$[\lambda]_1 = 0,083250 \frac{\sqrt{T/\widetilde{M}}}{\sigma^2}. \quad (7.54a)$$

Комментарий

Поправка второго приближения к коэффициенту теплопроводности $f_\lambda^{(2)}$ равна 1,0225.

Другие модели потенциала

Для определения коэффициента теплопроводности в первом приближении $[\lambda]_1$ для всех других моделей потенциала используются соответствующие каждой модели выражения для вязкости $[\eta]_1$ и соотношение (7.53).

7.4.2. Однокомпонентный молекулярный газ

Математическое выражение для коэффициента теплопроводности

Коэффициент теплопроводности в первом приближении метода Чепмена–Каулинга

$$[\lambda]_1 = \lambda^{\text{tr}} + \lambda^{\text{int}}, \quad (7.55)$$

где λ^{tr} и λ^{int} определены выражениями (5.29).

Комментарии

1. Формула (7.55) справедлива для коэффициента теплопроводности в первом приближении метода Чепмена–Каулинга.

2. Коэффициент теплопроводности в первом приближении $[\lambda]_1$ выражается через коэффициент вязкости в первом приближении $[\eta]_1$, и фактор Эйкена f :

$$[\lambda]_1 = f c_V [\eta]_1, \quad (7.56)$$

где $c_V = c^{\text{tr}} + c^{\text{int}}$ — полная удельная теплоемкость газа при постоянном объеме.

3. Выражение для фактора f определяется формулой (5.32).

Модель шероховатых сфер

Математическое выражение

Коэффициент теплопроводности в первом приближении Чепмена–Каулинга [5]

$$[\lambda]_1 = \frac{9}{16} \frac{k}{m} \frac{(\pi m k T)^{1/2}}{\pi \sigma^2} \frac{(K+1)^2 (50K^2 + 151K + 37)}{102K^3 + 101K^2 + 75K + 12}. \quad (7.57)$$

Фактор Эйкена

$$f = \frac{3}{10} \frac{k}{m} \frac{(13K + 6) (50K^2 + 151K + 37)}{102K^3 + 101K^2 + 75K + 12}. \quad (7.58)$$

Линеаризованная модель для газа с вращательными степенями свободы

Математическое выражение

Коэффициент теплопроводности [5, 6]

$$[\lambda]_1 = \lambda^{\text{tr}} + \lambda^{\text{rot}}, \quad (7.59)$$

$$\lambda^{\text{tr}} = \left[\frac{5}{2} c^{\text{tr}} - \frac{5}{\pi Z^{\text{rot}}} c^{\text{rot}} \left(\frac{5}{2} - \beta^{\text{rot}} \right)^{-1} \right] \eta, \quad (7.60)$$

$$\lambda^{\text{rot}} = \beta^{\text{rot}} c^{\text{rot}} \left[1 + \frac{2}{\pi Z^{\text{rot}}} \left(\frac{5}{2} - \beta^{\text{rot}} \right)^{-1} \right] \eta, \quad (7.61)$$

$$c^{\text{tr}} = \frac{3}{2} \frac{k}{m}, \quad c^{\text{rot}} = c_V - c^{\text{tr}}, \quad \beta^{\text{rot}} = \frac{\rho D^{\text{rot}}}{\eta}. \quad (7.62)$$

Фактор Эйкена

$$f = \frac{5}{2} \frac{c^{\text{tr}}}{c_V} + \frac{c^{\text{rot}}}{c_V} \beta^{\text{rot}} - \frac{2}{\pi Z^{\text{rot}}} \frac{c^{\text{rot}}}{c_V} \left(\frac{5}{2} - \beta^{\text{rot}} \right)^2. \quad (7.63)$$

Комментарии

1. Приводимые выражения получены из точных выражений кинетической теории (5.28) и (5.29) при линейизации этих выражений по параметру $(1/Z^{\text{rot}})$ и в предположении, что $c^{\text{int}} = c^{\text{rot}}$.

2. При конкретных расчетах фактора Эйкена по формуле (7.63) можно использовать значения Z^{rot} , вычисляемые по формулам (7.40) или (7.41). Значения β^{rot} определяются на основе полуэмпирической формулы Мейсона и Урайба [4], полученной в результате обработки экспериментальных данных по теплопроводности ряда молекулярных газов и использования расчетов Сандлера для моделей «нагруженных сфер» и «сфероцилиндров» [12]:

$$\beta^{\text{rot}} = \frac{Z^{\text{rot}}}{(Z_{\infty}^{\text{rot}})^{3/4}} \left(1,122 + 4,552 \frac{T^*}{T} \right), \quad \frac{T}{T^*} \leq T_{\text{cross}}^*, \quad (7.64)$$

$$\beta^{\text{rot}} = \frac{\rho D_{11}}{\eta} \left[1 + \frac{0,27}{Z^{\text{rot}}} - \frac{0,44}{(Z^{\text{rot}})^2} - \frac{0,90}{(Z^{\text{rot}})^3} \right], \quad \frac{T}{T^*} \geq T_{\text{cross}}^*.$$

Параметры Z_{∞}^{rot} , T^* и T_{cross}^* для ряда молекулярных газов приводятся в табл. 7.5.

Таблица 7.5. Приведенная температура T^* , число столкновений, необходимых для релаксации вращательно-поступательной энергии Z_{∞}^{rot} и приведенная температура сшивки T_{cross}^* различных выражений для β

Газ	T^* , К	Z_{∞}^{rot}	T_{cross}^*
N ₂	98,4	29,5	6,70
O ₂	121,1	28,0	7,30
NO	125,0	24,0	9,22
CO	98,4	22,2	10,48
CO ₂	245,3	32,0	5,94
N ₂ O	266,8	36,2	4,99
CH ₄	161,4	61,5	2,55
CF ₄	156,5	24,9	8,68
SF ₆	207,7	12,6	28,57

Линеаризованная модель для газа с вращательными и колебательными степенями свободы

Математическое выражение для фактора Эйкена

$$f = \frac{5}{2} \frac{c^{\text{tr}}}{c_V} + \frac{c^{\text{rot}}}{c_V} \beta^{\text{rot}} + \frac{c^{\text{vib}}}{c_V} \beta^{\text{vib}} - \frac{2}{\pi Z^{\text{rot}}} \frac{c^{\text{rot}}}{c_V} \left(\frac{5}{2} - \beta^{\text{rot}} \right)^2, \quad (7.65)$$

$$\beta^{\text{vib}} = \frac{\rho D^{\text{vib}}}{\eta}; \quad c_V = c^{\text{tr}} + c^{\text{rot}} + c^{\text{vib}}. \quad (7.66)$$

Обозначения

c^{tr} — вклад поступательных степеней свободы в удельную теплоемкость

c^{rot} — вклад вращательных степеней свободы в удельную теплоемкость

c^{vib} — вклад колебательных степеней свободы в удельную теплоемкость

λ^{tr} — коэффициент теплопроводности, обусловленной переносом кинетической энергии поступательного движения

λ^{rot} — коэффициент теплопроводности, обусловленной переносом энергии вращательных степеней свободы

λ^{vib} — коэффициент теплопроводности, обусловленной переносом энергии колебательных степеней свободы

\mathcal{D}_{11} — коэффициент самодиффузии

D^{rot} — коэффициент диффузии вращательной энергии

D^{vib} — коэффициент диффузии колебательной энергии

Z^{rot} — отношение характерных времен вращательной и поступательной релаксации.

Комментарий

Выражение (7.65) выводится методами кинетической теории при одновременном учете вращательных и колебательных степеней свободы молекул [5]. При этом используется линеаризация выражений по параметру $(1/Z^{\text{rot}})$, опущены члены порядка $(1/Z^{\text{vib}})$ (в предположении $Z^{\text{vib}} \gg 1$), опущены также некоторые мало существенные перекрестные члены (см. [5]).

Модель Эйкена

Коэффициент теплопроводности

$$\lambda = (f^{\text{tr}} c^{\text{tr}} + f^{\text{int}} c^{\text{int}}) \eta, \quad (7.67)$$

$$c^{\text{tr}} = \frac{3}{2} \frac{k}{m}; \quad c^{\text{int}} = c_V - c^{\text{tr}}; \quad f^{\text{tr}} = \frac{5}{2}; \quad f^{\text{int}} = 1.$$

Другая форма записи

$$\lambda = \frac{1}{4} (9\gamma - 5) c_V \eta. \quad (7.68)$$

Фактор Эйкена

$$f = 1 + \frac{9}{4} \frac{R}{\widetilde{M}_{cV}}. \quad (7.69)$$

Модифицированная модель Эйкена

Коэффициент теплопроводности

$$\lambda = (f^{\text{tr}} c^{\text{tr}} + f^{\text{int}} c^{\text{int}}) \eta,$$

Фактор Эйкена

$$f^{\text{tr}} = \frac{5}{2}, \quad f^{\text{int}} = \frac{\rho \mathcal{D}_{11}}{\eta}, \quad c^{\text{int}} = c^{\text{rot}} + c^{\text{vib}}. \quad (7.70)$$

Модель Мейсона–Мончика

Фактор Эйкена

$$f = \frac{5}{2} \frac{c^{\text{tr}}}{c_V} + \frac{c^{\text{int}}}{c_V} \frac{\rho \mathcal{D}_{11}}{\eta} - \frac{2}{\pi Z} \frac{c^{\text{int}}}{c_V} \left(\frac{5}{2} - \frac{\rho \mathcal{D}_{11}}{\mu} \right)^2 \Delta^{-1}, \quad (7.71)$$

$$\Delta = 1 + \frac{2}{\pi Z} \left(\frac{\rho \mathcal{D}_{11}}{\eta} + \frac{5}{2} \frac{c^{\text{int}}}{c^{\text{tr}}} \right),$$

$$c^{\text{int}} = c^{\text{rot}} + c^{\text{vib}}, \quad \frac{c^{\text{int}}}{Z} = \frac{c^{\text{rot}}}{Z^{\text{rot}}} + \frac{c^{\text{vib}}}{Z^{\text{vib}}}. \quad (7.72)$$

Комментарии

1. Модель Эйкена основана на выводах элементарной кинетической теории, в которой пренебрегается корреляцией между скоростью молекулы и ее внутренней энергией.

2. Модифицированная модель Эйкена более корректно учитывает диффузионный перенос внутренней энергии молекул с использованием коэффициента самодиффузии в соответствующем выражении для диффузионного потока. Сравнение с точными результатами кинетической теории (в частности, с выражением для λ в линеаризованной модели (7.59)–(7.62)) показывает, что рассматриваемая модель справедлива для $Z^{\text{rot}} \gg 1$ и при условии, что коэффициенты диффузии вращательной и колебательной энергии D^{rot} и D^{vib} заменяются на коэффициент самодиффузии \mathcal{D}_{11} .

3. В модели Мейсона–Мончика предполагается $D^{\text{rot}} = D^{\text{vib}} = \mathcal{D}_{11}$. При $Z^{\text{vib}} \gg 1$ справедливо соотношение $(c^{\text{int}}/Z^{\text{int}}) = (c^{\text{rot}}/Z^{\text{rot}})$, в этом случае выражение для f принимает вид

$$f = \frac{5}{2} \frac{c^{\text{tr}}}{c_V} + \frac{c^{\text{int}}}{c_V} \frac{\rho \mathcal{D}_{11}}{\eta} - \frac{2}{\pi Z^{\text{rot}}} \frac{c^{\text{rot}}}{c_V} \left(\frac{5}{2} - \frac{\rho \mathcal{D}_{11}}{\mu} \right)^2 \Delta^{-1}, \quad (7.73)$$

$$\Delta = 1 + \frac{2}{\pi Z^{\text{rot}}} \left(\frac{\rho \mathcal{D}_{11}}{\eta} + \frac{5}{2} \frac{c^{\text{rot}}}{c^{\text{tr}}} \right),$$

$$c^{\text{int}} = c^{\text{rot}} + c^{\text{vib}}.$$

Линеаризация выражения (7.73) по параметру Z^{-1} соответствует предположению $\Delta = 1$. Тогда выражение (7.73) совпадает с (7.65), если в (7.66) положить $D^{\text{rot}} = D^{\text{vib}} = \mathcal{D}_{11}$.

7.4.3. Смесь атомарных газов

Общие соотношения

Истинный коэффициент теплопроводности смеси атомарных газов в первом приближении вычисляется по формулам (5.54) и (5.55).

Комментарий

Для вычисления элементов определителей Λ_{ii}^{11} и Λ_{ij}^{11} ($i \neq j$) необходимо рассчитывать величины $[\lambda_{ii}]_1$, $[\lambda_{ij}]_1$, A_{ij}^* и B_{ij}^* . Коэффициенты $[\lambda_{ii}]_1$ для каждого из компонентов смеси рассчитываются по формуле

$$[\lambda_{ii}]_1 = \frac{15}{4} \frac{k}{m_i} [\eta_{ii}]_1 = \frac{75}{64} k \frac{(\pi k T / m_i)^{1/2}}{\pi \sigma_{ii}^2 \Omega_{ii}^{(2,2)*}(T^*)}. \quad (7.74)$$

Коэффициент $[\lambda_{ij}]_1$ находится по формуле

$$[\lambda_{ij}]_1 = \frac{15}{4} \frac{k}{2\mu_{ij}} [\eta_{ij}]_1 = \frac{75}{64} k \frac{(\pi k T / 2\mu_{ij})^{1/2}}{\pi \sigma_{ij}^2 \Omega_{ij}^{(2,2)*}}. \quad (7.75)$$

Параметр A_{ij}^* определяется выражением (7.29), а параметр B_{ij}^* выражением

$$B_{ij}^* = \frac{5\Omega_{ij}^{(2,2)*} - 4\Omega_{ij}^{(1,3)*}}{\Omega_{ij}^{(1,1)*}}. \quad (7.76)$$

Модель твердых сфер

При вычислении параметров $[\lambda_{ii}]_1$ и $[\lambda_{ij}]_1$ используются условия

$$\sigma_{ij} = \frac{\sigma_{ii} + \sigma_{jj}}{2}; \quad \Omega_{ij}^{(2,2)*} = 1; \quad A_{ij}^* = B_{ij}^* = 1. \quad (7.77)$$

Потенциал Ленарда–Джонса

Используются комбинационные правила

$$\sigma_{ij} = \frac{\sigma_{ii} + \sigma_{jj}}{2}; \quad \varepsilon_{ij} = \sqrt{\varepsilon_{ii} \varepsilon_{jj}}. \quad (7.78)$$

Комментарий

Значения величин $\Omega_{ij}^{(2,2)*}(T^*)$, A_{ij}^* и C_{ij}^* как функций T_{ij}^* для потенциала Ленарда–Джонса приводятся в [2]. Аппроксимирующие формулы для их вычисления см. (6.25).

Модель, основанная на принципе соответственных состояний

При вычислении $[\lambda_{ii}]_1$ и $[\lambda_{ij}]_1$ используются соотношения (7.74) и (7.75), связывающие эти параметры с величинами $[\eta_{ii}]_1$ и $[\eta_{ij}]_1$. Эти величины находятся с применением корреляционных соотношений

(7.10), справедливых для двухпараметрической модели, и комбинационных правил (7.78). Значения A_{ij}^* находятся по корреляционной формуле (7.29), значения B_{ij}^* приближенно определяются на основе потенциала Ленарда–Джонса (см. комментарий после формулы (7.78)).

Модель, основанная на использовании экспериментальных значений параметров смеси

Для расчета истинного коэффициента теплопроводности смеси по формулам (5.57) и (5.58) используются коэффициенты Λ_{ii}^{11} и Λ_{ij}^{11} , в которых вместо $[\lambda_{ii}]_1$ применяются экспериментально определяемые значения истинных коэффициентов теплопроводности компонентов смеси λ_i , а вместо $[\lambda_{ij}]_1$ — выражение

$$\lambda_{ij} = \frac{25}{8} k \frac{n \mathcal{D}_{ij}}{A_{ij}^*}, \quad (7.79)$$

в которое подставляются экспериментальные значения коэффициентов диффузии бинарной смеси \mathcal{D}_{ij} . Значения A_{ij}^* и B_{ij}^* определяются так же, как в предыдущем случае.

Приближенные и полуэмпирические выражения для коэффициентов теплопроводности смеси

Расчетные формулы

Формула Брокау

$$[\lambda]_1 = \sum_{i=1}^N \frac{[\lambda_{ii}]_1}{1 + \sum_{j \neq i} \frac{x_j}{x_i} \Psi_{ij}}, \quad (7.80)$$

$$\Psi_{ij} = \Phi_{ij} \left\{ 1 + \left(\frac{\widetilde{M}_i - \widetilde{M}_j}{\widetilde{M}_i + \widetilde{M}_j} \right)^2 \left(\frac{15}{4A_{ij}^*} - 1 \right) \left[1 + \left(\frac{12B_{ij}^* + 5}{30 - 8A_{ij}^*} \right) \right] \frac{\widetilde{M}_j}{\widetilde{M}_i - \widetilde{M}_j} \right\}.$$

Здесь Φ_{ij} определено выражением (7.31), коэффициенты A_{ij}^* и B_{ij}^* — выражениями (7.26) и (7.76).

Формула Саксены–Мейсона

$$\lambda = \sum_{i=1}^N \left[\lambda_i / \left(1 + \sum_{j \neq i} \frac{x_j}{x_i} \varphi_{ij} \right) \right], \quad (7.81)$$

$$\varphi_{ij} = \frac{1,065}{2\sqrt{2}} \left(\frac{\widetilde{M}_j}{\widetilde{M}_i + \widetilde{M}_j} \right)^{1/2} \left[1 + \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_j} \right)^{1/2} \left(\frac{\widetilde{M}_i}{\widetilde{M}_j} \right)^{1/4} \right]^2.$$

Формула Армали–Саттона

$$\lambda = \sum_{i=1}^N \frac{\lambda_i}{1 + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{x_j}{x_i} \frac{\frac{15}{4} \widetilde{M}_i^2 + \frac{5}{4} \widetilde{M}_j^2 + 2 \widetilde{M}_i \widetilde{M}_j A_{ij}^*}{(\widetilde{M}_i + \widetilde{M}_j)^2 A_{ij}^*}} \Phi_{ij} \quad (7.82)$$

$$\Phi_{ij} = \frac{[F_{ij} + (\lambda_i / \lambda_j)^{1/2} (\widetilde{M}_i / \widetilde{M}_j)^{1/4} B_{ij}]^2}{2\sqrt{2} (1 + \widetilde{M}_i / \widetilde{M}_j)^{1/2}}.$$

Обозначения

$[\lambda_{ii}]_1$ — коэффициент теплопроводности газа частиц компонента i (первое приближение теории Чепмена–Каулинга)

λ_i — экспериментальное значение коэффициента теплопроводности газа частиц компонента i .

Комментарии

1. Формула Брокау (7.80) получена в результате разложения отношения определителей в выражении для $[\lambda]_1$ в бесконечный ряд с аппроксимацией первым членом ряда (формула (5.16)). При этом используется условие малости недиагональных матричных элементов Λ_{ij}^{11} по сравнению с диагональными.

2. Значение коэффициента 1,065 в формуле Саксены–Мейсона (7.81) является результатом сравнения теоретических и экспериментальных значений коэффициентов теплопроводности ряда газовых смесей для различных концентраций компонентов при атмосферном давлении в широком интервале температур на основе известных экспериментальных значений теплопроводностей чистых газов λ_i .

3. Эмпирические параметры B_{ij} , F_{ij} в формуле Армали–Саттона (7.82) подбираются, исходя из наилучшего совпадения с экспериментом в достаточно широком интервале температур и концентраций компонентов смеси.

7.4.4. Коэффициент теплопроводности смеси молекулярных газов

Модель Эйкена–Гиршфельдера [7]

Коэффициент теплопроводности

$$\lambda = \lambda_{\text{Mon}} + \sum_{i=1}^N n c_i^{\text{int}} \mathcal{D}_{ii} \left[1 + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{x_j \mathcal{D}_{ii}}{x_i \mathcal{D}_{ij}} \right]^{-1}. \quad (7.83)$$

Модель Мейсона–Урайба [4]

Коэффициент теплопроводности

$$\lambda = \lambda_{\text{Mon}} + \sum_{i=1}^N [\lambda_i - \lambda_{i \text{ Mon}}] \left[1 + \sum_{\substack{j=1, j \neq i}}^N \frac{x_j \mathcal{D}_{ii}}{x_i \mathcal{D}_{ij}} \right]^{-1}. \quad (7.84)$$

Комментарии

1. Составляющая $\lambda_{\text{Мон}}$ в формуле (7.84) вычисляется на основе формул (5.57) и (5.58) для истинного коэффициента теплопроводности смеси атомарных газов с использованием расчетных значений $[\lambda_{ii}]_1$ и $[\lambda_{ij}]_1$.

2. Значения λ_i соответствуют либо рассчитанным значениям коэффициентов теплопроводности однокомпонентного молекулярного газа (например, по формулам (7.70), (7.71) модели Мейсона–Мончика), либо по экспериментальным значениям этих коэффициентов.

3. Значения $\lambda_{i \text{ Мон}}$ определяются по формуле

$$\lambda_{i \text{ Мон}} = \frac{15}{4} \frac{k}{m_i} \eta_i, \quad (7.85)$$

где η_i — коэффициент вязкости однокомпонентного газа, рассчитанный по формулам для атомарных газов либо определяемый экспериментально.

4. Коэффициенты самодиффузии \mathcal{D}_{ii} и бинарной диффузии \mathcal{D}_{ij} определяются на основе выражений (7.46) и (7.42) либо также берутся из эксперимента.

Список литературы к главе 7

1. Чепмен С., Каулинг Т. Математическая теория неоднородных газов. — М.: Изд-во иностр. лит., 1960. — 510 с.
2. Гирифельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей. — М.: Изд-во иностр. лит., 1961. — 930 с.
3. Ферцигер Дж., Капер Г. Математическая теория процессов переноса в газах. — М.: Мир, 1976. — 554 с.
4. Transport properties of fluids / Ed. I. Millat, J. H. Dymond and C. A. Nieto de Castro. — London: Cambridge University Press, 1996. — 478 p.
5. Жданов В. М., Алиевский М. Я. Процессы переноса и релаксации в молекулярных газах. — М.: Наука, 1989. — 335 с.
6. Mason E. A., Monchick L. Heat conductivity of polyatomic and polar gases // J. Chem. Phys. 1962. V. 36, No. 6. P. 1622–1632.
7. Мейсон Е. Перенос в нейтральном газе // Кинетические процессы в газах и плазме / Под ред. А. Хохштима. — М.: Атомиздат, 1972. — С. 52–91.
8. Соколова И. А. Обзоры по теплофизическим свойствам веществ. № 2(94). — М.: ИВТАН, 1992. — 100 с.
9. Parker J. G. Rotational and vibrational relaxation in diatomic gases // Phys. Fluids. 1959. V. 2. P. 449–461.
10. Brau C. A., Johnkman R. H. Classical theory of rotational relaxation in diatomic gases // J. Chem. Phys. 1970. V. 52. P. 477–484.
11. Соколова И. А. Обзоры по теплофизическим свойствам веществ. № 6(86). — М.: ИВТАН, 1990. — 140 с.
12. Sandler S. I. Thermal conductivity of polyatomic gases // Phys. Fluids. 1968. V. 11. P. 2549–2555.

Глава 8

ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ В ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКОЙ ГАЗОДИНАМИКЕ

Постулируется, что общей, наиболее подробной системой уравнений газодинамики течений многоатомных реагирующих газов является система, включающая уравнения баланса уровневой кинетики для всех возбужденных внутренних степеней свободы частиц. Источниковые части этих уравнений баланса предполагаются известными (эмпирическими или полуэмпирическими) функциями от заселенностей и поступательной температуры. Соотношения переноса записываются в так называемом неравновесном приближении Гиршфельдера–Эйкена, когда тензор давлений и основная часть векторных соотношений переноса даются изложенными в предыдущих главах выражениями, справедливыми для смесей атомарных (бесструктурных) газов, влияние неравновесного возбуждения внутренних степеней свободы на соотношения переноса обусловлено только транспортировкой внутренней энергии частиц путем диффузии заселенностей, соответствующие слагаемые входят в формулы для диффузионных скоростей заселенностей и плотности теплового потока. Эти слагаемые пропорциональны градиентам заселенностей, коэффициенты пропорциональности выражаются через коэффициенты бинарной диффузии атомарных газов.

Обоснование того, что эта система действительно может быть замкнута при малых числах Кнудсена, дается обобщенным методом Чепмена–Энскога (гл. 9). Вывод соотношений переноса в неравновесном приближении Гиршфельдера–Эйкена из уравнений данного метода рассмотрен в гл. 10.

Рассматриваемая система уравнений газодинамики с уровневой кинетикой позволяет с единой точки зрения получать замкнутые системы уравнений для частных случаев, характеризующихся определенными взаимоотношениями времен релаксации. В источниковых слагаемых уравнений баланса появляются большие и малые слагаемые, заселенности представляются рядами по малому параметру ϵ . Учет только нулевых (по ϵ) членов этих рядов дает более простые системы уравнений для медленных газодинамических переменных, в которых, однако, отсутствуют объемная вязкость и релаксационное давление. Для при-

ближенного вычисления этих слагаемых тензора давлений необходимо найти первые члены рядов. Ниже даны соответствующие примеры.

8.1. Общие уравнения физико-химической газодинамики — модель уровневой кинетики

Назначение

Описание высокотемпературных течений газов как сплошной среды при произвольных отклонениях от локального равновесия по внутренним степеням свободы в различных областях течения.

Определение

Общими уравнениями физико-химической газодинамики являются уравнения баланса с уровневой кинетикой для всех внутренних степеней свободы частиц.

Допущения

1. Общие уравнения физико-химической газодинамики получаются на основе механики многокомпонентных сред [1–7]. Газовая среда трактуется как многокомпонентная смесь, где каждый компонент состоит из частиц с массами m_i и внутренней энергией $E_{i\alpha}$, характеризуется химическим составом ($i = 1, 2, \dots, N$, где N — число химических компонентов смеси идеальных газов) и внутренними квантовыми энергетическими состояниями α .

2. Индекс α является конечным набором индексов, зависящим от структуры частицы и степени возбуждения квантовых уровней. Например, $\alpha = \alpha_R \alpha_V^{(1)} \dots \alpha_V^{(n)} \alpha_{эл}$, где $\alpha_R, \alpha_V^{(m)}, \alpha_{эл}$ — номера вращательных, колебательных (для моды m), электронных квантовых уровней соответственно, принимающие все возможные значения для частиц компонента i . Для двухатомной молекулы с возбужденными вращениями и колебаниями $\alpha = \alpha_R \alpha_V$. Ее внутренняя энергия

$$E_{i\alpha} = E_{i\alpha_R \alpha_V}^{\text{rot}} + E_{i\alpha_R \alpha_V}^{\text{vib}}$$

состоит из вращательной (rot) и колебательной (vib) энергии. Если колебательная энергия не зависит от вращательного уровня, то $E_{i\alpha_R \alpha_V}^{\text{vib}} \approx E_{i\alpha_V}$.

3. Для бесструктурных (одноатомных) частиц греческие индексы опускаются.

4. Течение смеси газов описывается единой температурой и среднemasсовой скоростью \mathbf{v} , т. е. используется одножидкостное приближение. Двухжидкостное приближение применяется при описании плазмы (гл. 11).

5. Внутренние моменты импульса частиц отсутствуют. Поэтому уравнение момента импульса [1] не учитывается, вращательная вязкость не рассматривается.

6. См. также описание допущений в гл. 4.

8.1.1. Система уравнений уровневой кинетики

Уравнения баланса заселенностей квантовых состояний α частиц компонент i

$$\frac{dn_{i\alpha}}{dt} + n_{i\alpha} \nabla \cdot \mathbf{v} + \nabla \cdot n_{i\alpha} \mathbf{V}_{i\alpha} = K_{i\alpha}. \quad (8.1)$$

Уравнение движения

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} + \nabla \cdot \mathbf{\Pi} - \sum_i \rho_i \mathbf{F}_i = 0, \quad \mathbf{\Pi} = P\delta + \boldsymbol{\pi}. \quad (8.2)$$

Уравнения баланса внутренней энергии

$$\rho \frac{du}{dt} + \mathbf{\Pi} : \nabla \mathbf{v} + \nabla \cdot \mathbf{q} - \sum_i \rho_i \mathbf{V}_i \cdot \mathbf{F}_i = 0 \quad (8.3)$$

или

$$\begin{aligned} n \frac{d\mathcal{E}}{dt} + P \nabla \cdot \mathbf{v} + \boldsymbol{\pi} : \nabla \mathbf{v} + \nabla \cdot \mathbf{q} - \\ - \sum_i \rho_i \mathbf{F}_i \cdot \mathbf{V}_i - \mathcal{E} \nabla \cdot \sum_i n_i \mathbf{V}_i + \mathcal{E} \sum_i K_i = 0, \end{aligned} \quad (8.4)$$

где внутренняя энергия единицы массы среды для смеси идеальных газов равна

$$u = \frac{n}{\rho} \mathcal{E}.$$

Внутренняя энергия смеси газов, отнесенная к числу частиц

$$\mathcal{E} = \frac{3}{2} kT_t + \mathcal{E}^{\text{int}}; \quad \mathcal{E}^{\text{int}} = \frac{1}{n} \sum_{i\alpha} n_{i\alpha} (E_{i\alpha} + E_i^{\text{ch}}). \quad (8.5)$$

Комментарии

1. Уравнения (8.1)–(8.4) образуют замкнутую систему уравнений при известных выражениях для $\mathbf{V}_{i\alpha}$, $K_{i\alpha}$, $\mathbf{\Pi}$, \mathbf{q} , \mathcal{E} . Они описывают, например, течения легких газов (H_2 , D_2 , HO и т.д.) с вращательной релаксацией, если заменить $\alpha \rightarrow \alpha_R$ и опустить слагаемые, обусловленные химическими реакциями (см. введение [2]).

2. Источниковые слагаемые $K_{i\alpha}$ — заданные функции температуры и заселенностей квантовых состояний частиц смеси газов.

3. Решением системы уравнений $K_{i\alpha} = 0$ являются локально равновесные распределения заселенностей квантовых состояний частиц смеси газов по их энергиям.

4. Уравнения баланса записываются в виде, используемом в кинетической теории (гл. 4, 5).

Обозначения

\mathcal{E} — внутренняя энергия смеси, отнесенная к числу ее частиц

\mathcal{E}^{int} — составляющая внутренней энергии смеси, обусловленная внутренней энергией молекул

E_i^{ch} — энергия образования частиц компонента i (при наличии химических реакций).

Другие обозначения см. введение.

8.1.2. Следствия системы уравнений баланса заселенностей

Уравнения баланса числа частиц компонентов i

$$\frac{dn_i}{dt} + n_i \nabla \cdot \mathbf{v} + \nabla \cdot n_i \mathbf{V}_i = K_i. \quad (8.6)$$

Комментарии

1. Уравнение (8.6) получается суммированием уравнения (8.1) по всем квантовым состояниям α .

2. Слагаемое K_i отлично от нуля для химических реакций.

Уравнение баланса числа частиц смеси

$$\frac{dn}{dt} + n \nabla \cdot \mathbf{v} + \nabla \cdot \sum_i n_i \mathbf{V}_i = \sum_i K_i. \quad (8.7)$$

Комментарии

1. Уравнение (8.7) получается суммированием уравнения (8.6) по i .

2. При сохранении числа частиц сумма $\sum_i K_i$ равна нулю.

Уравнения баланса относительных заселенностей квантовых состояний α частиц компонентов i

$$n_i \frac{dy_{i\alpha}}{dt} + \nabla \cdot n_i y_{i\alpha} \mathbf{V}_{i\alpha} - y_{i\alpha} \nabla \cdot n_i \mathbf{V}_i = K_{i\alpha} - y_{i\alpha} K_i. \quad (8.8)$$

Уравнения баланса массовых заселенностей квантовых состояний α частиц компонентов i

$$\frac{d\rho_{i\alpha}}{dt} + \rho_{i\alpha} \nabla \cdot \mathbf{v} + \nabla \cdot \rho_{i\alpha} \mathbf{V}_{i\alpha} = R_{i\alpha}; \quad R_{i\alpha} = m_i K_{i\alpha}. \quad (8.9)$$

Комментарии

1. Уравнение баланса массы компонента i получается суммированием уравнения (8.9) по α . Уравнение для массовой доли компонента i (уравнение диффузии), уравнение сохранения массы смеси (уравнение неразрывности) и уравнение сохранения массы непревращающихся частиц приведены в гл. 1.

2. При использовании вместо уравнений (8.1) их следствий общее число дифференциальных уравнений должно сохраняться. При суммировании системы уравнений (8.8) для каждого значения индекса i по α получается тождество, поэтому вместо одного из уравнений (8.8) применяется равенство $\sum_{\alpha} y_{i\alpha} = 1$.

Уравнения сохранения концентраций непревращающихся частиц

$$\frac{dn_d}{dt} + n_d \nabla \cdot \mathbf{v} + \nabla \cdot n_d \mathbf{V}_d = 0, \quad d = 1, \dots, N_a. \quad (8.10)$$

Обозначения

n_d — концентрация непревращающихся частиц компонента d

N_a — число непревращающихся частиц в смеси

$X_i^{(d)}$ — число непревращающихся частиц компонента d в молекуле компонента i .

Другие обозначения см. введение.

Определения

Число непревращающихся частиц компонента d в единице объема (концентрация)

$$n_d = \sum_{i=1}^N X_i^{(d)} n_i. \quad (8.11)$$

Непревращающиеся частицы — не изменяющиеся в ходе химических реакций фрагменты молекул, в частности — атомы (в литературе применяются также термины: элементы, химические элементы, неделимые частицы).

Диффузионная скорость непревращающихся частиц

$$\mathbf{V}_d = \frac{1}{n_d} \sum_{i=1}^N X_i^{(d)} n_i \mathbf{V}_i. \quad (8.12)$$

Другие определения см. введение.

8.2. Приближенные соотношения для переносных свойств

Назначение

Выражения для дивергенции (следа) P тензора давлений и для переносных свойств π , $\mathbf{V}_{i\alpha}$, \mathbf{q} через газодинамические переменные, замыкающие общую систему уравнений физико-химической газодинамики с уравневой кинетикой (при заданных $K_{i\alpha}$).

Допущения

1. Предполагаются известными результаты кинетической теории для переносных свойств смеси атомарных газов, изложенные в предыдущих главах.

2. При столкновениях частицы не обмениваются внутренней энергией, т.е. все столкновения — упругие, сечения столкновений не зависят от квантовых состояний частиц, т.е. осреднены по этим состояниям. Внутренняя энергия частиц переносится при диффузии заселенностей.

Переносные свойства

Выражения для тензора давлений, векторов диффузионных скоростей химических компонентов смеси, вектора плотности приведенного теплового потока и входящие в эти выражения коэффициенты переноса такие же, как и в N -компонентной смеси атомарных газов.

Дивергенция (след) тензора давлений

$$P = nkT_t. \quad (8.13)$$

Температура

Температура газа T_t есть мера поступательной энергии частиц (поступательная температура).

Бездивергентный тензор напряжений

$$\boldsymbol{\pi} = -2\eta\mathbf{S}. \quad (8.14)$$

Векторы диффузионных скоростей частиц химических компонентов

$$\mathbf{V}_i = - \sum_j D_{ij} \mathbf{d}_j - D_{Ti} \nabla \ln T_t, \quad (8.15a)$$

где термодинамическая сила химического компонента j

$$\mathbf{d}_j = \nabla x_j + (x_j - \alpha_j) \nabla \ln p - \frac{\rho_j}{p} \left(\mathbf{F}_j - \sum_k \alpha_k \mathbf{F}_k \right); \quad p = nkT_t. \quad (8.15б)$$

Соотношения Стефана–Максвелла

$$\mathbf{d}_i = \sum_j \alpha_{ij} (\mathbf{V}_j - \mathbf{V}_i) - k_{Ti} \nabla \ln T \sim \sum_j \frac{x_i x_j}{\mathcal{D}_{ij}} (\mathbf{V}_j - \mathbf{V}_i), \quad (8.15в)$$

$$i, j = 1, 2, \dots, N$$

(правая часть этой формулы дана в первом приближении по полиномам Сонина, пренебрегая термодиффузией).

Вектор плотности приведенного теплового потока

$$\mathbf{h} = -\lambda' \nabla T_t - p \sum_i D_{Ti} \mathbf{d}_i = -\lambda \nabla T + p \sum_i k_{Ti} \mathbf{V}_i. \quad (8.15г)$$

Комментарии

1. Коэффициенты переноса η , λ' , λ , D_{ij} , D_{Ti} , α_{ij} , k_{Ti} даются известными выражениями для смеси одноатомных частиц с массами m_i , $i = 1, 2, \dots, N$, и зависят от x_i , T_t и сечений упругих столкновений (см. гл. 4–7).

2. Вектор $\mathbf{V}_{i\alpha}$ и вклад внутренней энергии частиц в тепловой поток определяются следующим образом. При сделанных предположениях для рассматриваемой смеси частиц сорта $i\alpha$ справедливо обобщение соотношений Стефана–Максвелла, получаемое из формулы (8.15в) заменой индексов i, j на $i\alpha, j\beta$ соответственно. В первом приближении

по полиномам Сонина и при пренебрежении термодиффузией для $\mathbf{d}_{i\alpha}$ получается выражение

$$\mathbf{d}_{i\alpha} \approx \sum_{j\beta} \mathcal{D}_{i\alpha j\beta}^{-1} x_i x_j y_{i\alpha} y_{j\beta} (\mathbf{V}_{j\beta} - \mathbf{V}_{i\alpha}). \quad (8.16)$$

Здесь термодинамические диффузионные силы

$$\begin{aligned} \mathbf{d}_{i\alpha} &= \nabla \frac{n_{i\alpha}}{n} + \left(\frac{n_{i\alpha}}{n} - \frac{\rho_{i\alpha}}{\rho} \right) \nabla \ln p - \frac{\rho_{i\alpha}}{p} \left(\mathbf{F}_i - \sum_k \frac{\rho_k}{\rho} \mathbf{F}_k \right) = \\ &= y_{i\alpha} \mathbf{d}_i + x_i \nabla y_{i\alpha}, \end{aligned} \quad (8.17)$$

вектор \mathbf{d}_i определен формулой (8.15б). В первом приближении по полиномам Сонина коэффициенты бинарной диффузии не зависят от концентраций частиц, а только от плотности смеси. Поэтому

$$\mathcal{D}_{i\alpha j\beta} = \mathcal{D}_{ij}.$$

Учитывая это равенство и соотношения

$$\sum_{\alpha} y_{i\alpha} (\mathbf{V}_{i\alpha} - \mathbf{V}_i) = 0; \quad \sum_{\alpha} y_{i\alpha} = 1,$$

приравнивая векторы $\mathbf{d}_{i\alpha}$, \mathbf{d}_i правым частям формул (8.17), (8.15в) соответственно, из уравнения (8.16) находим искомое выражение для диффузионной скорости частиц сорта $i\alpha$.

Переносные свойства

Вектор диффузионной скорости частиц сорта $i\alpha$

$$\mathbf{V}_{i\alpha} = \mathbf{V}_i - \frac{\sigma_i}{n_i} \nabla \ln y_{i\alpha}; \quad \sigma_i = n_i \left(\sum_j \frac{x_j}{\mathcal{D}_{ij}} \right)^{-1}. \quad (8.18)$$

Вектор плотности полного теплового потока

$$\mathbf{q} = \mathbf{h} + \sum_{i\alpha} H_{i\alpha} n_{i\alpha} \mathbf{V}_{i\alpha}; \quad \varepsilon_i = \frac{1}{kT_t} \sum_{\alpha} y_{i\alpha} (E_{i\alpha} + E_i^{\text{ch}}). \quad (8.19)$$

Вектор плотности полного теплового потока

$$\mathbf{q} = \mathbf{q}_t + \mathbf{q}_v. \quad (8.20a)$$

Вектор плотности теплового потока, обусловленного переносом поступательной энергии частиц

$$\mathbf{q}_t = \mathbf{h} + \frac{5}{2} kT_t \sum_i n_i \mathbf{V}_i, \quad (8.20б)$$

где первое слагаемое дается формулой (8.15г).

Вектор плотности теплового потока, обусловленного переносом внутренней энергии частиц

$$\mathbf{q}_v = \sum_i (E_i + E_i^{\text{ch}}) n_i \mathbf{V}_i + \delta q, \quad E_i = \sum_{\alpha} y_{i\alpha} E_{i\alpha}. \quad (8.20\text{в})$$

Неравновесная поправка Гирифельдера–Эйкена к вектору плотности теплового потока, обусловленная градиентами заселенностей

$$\begin{aligned} \delta q &= \sum_{i\alpha} E_{i\alpha} n_{i\alpha} (\mathbf{V}_{i\alpha} - \mathbf{V}_i) = - \sum_i \sigma_i \nabla \sum_{\alpha} E_{i\alpha} y_{i\alpha} = \\ &= - \sum_i n_i \left(\sum_j \frac{x_j}{\mathcal{D}_{ij}} \right)^{-1} \nabla \sum_{\alpha} E_{i\alpha} y_{i\alpha}, \end{aligned} \quad (8.21)$$

причем в формулах (8.20в), (8.21) и далее поправка δq является вектором.

Комментарии

1. В выражении (8.19) \mathbf{h} — вектор плотности приведенного теплового потока, второй член правой части этой формулы соответствует плотности потока энтальпии, обусловленного диффузией частиц сортов $i\alpha$ в системе координат, движущейся с местной среднemasсовой скоростью.

2. В N -компонентной смеси атомарных газов индекс α опускается, $H_i = 5kT_t/2$. В рассматриваемом случае энтальпия

$$H_{i\alpha} = \frac{5}{2} kT_t + E_{i\alpha} + E_i^{\text{ch}}.$$

После этого (с учетом приведенных формул и равенства $n_i \mathbf{V}_i = \sum_{\alpha} n_{i\alpha} \mathbf{V}_{i\alpha}$) получаются выражения (8.20).

3. Приближенные выражения для переносных свойств (8.14), (8.15), (8.20), (8.21) обычно применяются при практических расчетах.

4. Строгие выражения для переносных свойств даны в разд. 9.1, уточнение и обобщение изложенной в данном разделе методики проведено в гл. 10.

Примечания

1. Система уравнений физико-химической газодинамики при сформулированных предположениях называется системой уравнений в приближении Навье–Стокса (или уравнениями Навье–Стокса).

2. При $\boldsymbol{\pi} = 0$, $\mathbf{V}_{i\alpha} = 0$, $\mathbf{q} = 0$ получается система уравнений в приближении Эйлера (или уравнения Эйлера).

3. Аналогичные определения используются в литературе для краткости: уравнениями Навье–Стокса и Эйлера называются уравнения сохранения импульса (уравнения движения) в соответствующих приближениях [4].

Обозначения

T_t — поступательная температура

\mathbf{S} — тензор скоростей сдвига

λ', λ — парциальный и истинный коэффициенты теплопроводности

k_{Ti} — термодиффузионное отношение компонента i

α_{ij} — коэффициент в соотношении Стефана–Максвелла (8.15в)

δq — неравновесная поправка Гиршфельдера–Эйкена к вектору теплового потока

σ_i — коэффициент диффузии заселенностей компонента i (8.18).

8.3. Конкретные виды уравнений физико-химической газодинамики

Назначение

Описание течений газов как сплошной среды при конкретных уровнях возбуждения внутренних степеней свободы молекул и соотношениях между их временами релаксации и характерным газодинамическим временем t_* .

Комментарии

1. В конкретных ситуациях в правых частях уравнений баланса заселенностей (8.1) содержатся слагаемые различного порядка малости. Получается сингулярно возмущенная система уравнений. В соответствии с этим возникают быстрые и медленные переменные. Уравнения для медленных переменных входят в получающуюся систему уравнений для меньшего числа газодинамических переменных. Уравнения для быстрых переменных решаются методом малых возмущений. В результате заселенности представляются рядами $n_{i\alpha} = n_{i\alpha}^{(0)} + \varepsilon n_{i\alpha}^{(1)} + \dots$ по малому параметру ε , быстрые переменные выражаются через медленные. Во всех случаях газодинамические переменные ρ , \mathbf{v} , T являются медленными.

2. В частных случаях приведенные в разд. 8.2 выражения для тензорных и векторных переносных свойств остаются неизменными за исключением формул для диффузионных скоростей $\mathbf{V}_{i\alpha}$ и неравновесной поправки Гиршфельдера–Эйкена δq : в формулах (8.18), (8.21) относительные заселенности $y_{i\alpha}$ заменяются на $y_{i\alpha}^{(0)}$. При помощи следующего члена разложения $\varepsilon n_{i\alpha}^{(1)}$ вычисляются коэффициент объемной вязкости и релаксационное давление.

3. В соответствии с принятым в газодинамике подходом, в частных случаях поступательная температура газа T_t заменяется на температуру T , определяемую с учетом внутренней энергии частиц для быстрых неупругих процессов. При использовании T_t слагаемые, аналогичные объемной вязкости и релаксационному давлению, появляются в выражении для внутренней энергии газа.

4. Теория кардинально упрощается, если пренебрегать объемной вязкостью и релаксационным давлением: не нужно определять слагаемое разложения $\varepsilon n_{i\alpha}^{(1)}$ и заменять T_t на T .

5. Проводимое в данном разделе преобразование релаксационных (источниковых) слагаемых уравнений переноса носит формальный характер, так как на практике получение этих слагаемых осуществляется полуэмпирическим способом для каждой конкретной ситуации [8].

6. Применяемый ниже метод вывода частных систем уравнений физико-химической газодинамики из системы уравнений с уровневой кинетикой дает их правильную структуру, но только приближенные значения коэффициента объемной вязкости и релаксационного давления (см. разд. 9.3).

8.3.1. Смесь атомарных газов

Д о п у щ е н и е

Молекулы не имеют внутренней энергии (внутренние степени свободы молекул заморожены).

Вывод системы уравнений

Опускаются: индекс α , величины ε^{int} и K_i .

Газодинамические переменные: n_i , \mathbf{v} , T_t .

Система уравнений

$$\frac{dn_i}{dt} + n_i \nabla \cdot \mathbf{v} + \nabla \cdot n_i \mathbf{V}_i = 0, \quad (8.22)$$

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} + \nabla P - \nabla \cdot 2\eta \mathbf{S} - \sum_i \rho_i \mathbf{F}_i = 0, \quad (8.23)$$

$$P = p = nkT_t, \quad (8.24)$$

$$\rho \frac{d}{dt} \frac{3}{2} \frac{p}{\rho} + (p\delta - 2\eta \mathbf{S}) : \nabla \mathbf{v} + \nabla \cdot \mathbf{q} - \sum_i \rho_i \mathbf{V}_i \cdot \mathbf{F}_i = 0. \quad (8.25)$$

8.3.2. Смесь молекулярных газов — модель быстрых обменов

Д о п у щ е н и я

1. Все времена релаксации внутренних степеней свободы много меньше t_* , т. е. состояние смеси близко к локально равновесному.

2. Химические реакции отсутствуют.

Вывод системы уравнений

1. В безразмерной форме уравнения (8.8) в приближении Эйлера записываются в виде,

$$n_i^* \frac{dy_{i\alpha}^*}{dt^*} = \frac{1}{\varepsilon} K_{i\alpha}^*; \quad \varepsilon = \frac{\tau_*}{t_*} \ll 1, \quad (8.26)$$

где τ_* — максимальное из времен релаксации внутренних степеней свободы (учет диффузионных скоростей дает вклады более высокого порядка малости, в отсутствие химических реакций $K_i = 0$).

2. Решение системы уравнений (8.26) представляется рядом по ε :

$$y_{i\alpha} = y_{i\alpha}^{(0)} + \varepsilon y_{i\alpha}^{(1)} + \dots \quad (8.27)$$

3. Нулевое приближение:

$$K_{i\alpha} = 0. \quad (8.28)$$

Решение: $y_{i\alpha}^{(0)} = y_{i\alpha}^{\text{eq}}(T_t)$ — локально равновесная функция.

4. Первое приближение:

$$y_{i\alpha}^{(1)} = A_{i\alpha}(T_t) \nabla \cdot \mathbf{v}. \quad (8.29)$$

5. Введение вместо T_t температуры T , определяемой энергией поступательных и внутренних степеней свободы молекул, приводит к выражениям

$$\mathcal{E} = \frac{3}{2} kT + \mathcal{E}_{\text{eq}}^{\text{int}}(x_i, T); \quad \mathcal{E}_{\text{eq}}^{\text{int}} = \sum_{i\alpha} x_i y_{i\alpha}^{\text{eq}}(T) E_{i\alpha}. \quad (8.30)$$

6. Возмущение $\varepsilon y_{i\alpha}^{(1)}$ определяет вклад в дивергенцию тензора давлений: выражение (8.13) заменяется формулой

$$P = p - \varsigma \nabla \cdot \mathbf{v}; \quad p = nkT. \quad (8.31)$$

Более полное описание применения приведенного выше метода при ряде упрощений дано в п. 8.4.1.

Газодинамические переменные: n_i, \mathbf{v}, T .

Комментарий

Быстрыми переменными являются относительные заселенности $y_{i\alpha}$.

Система уравнений

Система уравнений (8.22), уравнение движения (8.23), где вместо уравнения (8.24) справедлива формула (8.31), и уравнение баланса внутренней энергии (8.4), где величина \mathcal{E} дается формулой (8.30).

Переносные свойства

Поступательная температура T_t заменяется на температуру T .

Поправка Гиршфельдера–Эйкена (8.21)

$$\delta q = - \sum_i \sigma_i c_{vi} \nabla T; \quad c_{vi} = \frac{d}{dT} \sum_{\alpha} E_{i\alpha} y_{i\alpha}^{\text{eq}}(T),$$

где c_{vi} — удельная теплоемкость при постоянном объеме компонента i , обусловленная внутренней энергией частиц.

Комментарии

1. В формуле (8.27) и в аналогичных формулах, приводимых ниже, многоточие заменяет слагаемые ряда более высокого порядка малости.

2. Большой набор скалярных переменных $y_{i\alpha}$ заменяется одной скалярной переменной — температурой.

3. В выражении для поправки (8.21) переменная $y_{i\alpha}$ заменяется первым членом разложения (8.27), т. е. локально равновесной функцией от температуры. Следующие члены этого разложения не учитываются, так как они дают вклады более высокого порядка малости. Такая же методика применяется и других частных случаях.

8.3.3. Смесь молекулярных реагирующих газов — модель быстрых обменов

Допущение

В отличие от модели, рассмотренной в п. 8.3.2, учитываются химические реакции, времена релаксации которых много меньше t_* .

Вывод системы уравнений

Вывод системы уравнений делается аналогично п. 8.3.2 (в общем случае с учетом уравнений (8.6), (8.7), (8.10)). Решение уравнений нулевого приближения: $n_{i\alpha}^{(0)} = n_i y_{i\alpha}^{\text{eq}}(T)$, где $y_{i\alpha}^{\text{eq}}(T)$ — локально равновесная (больцмановская) функция распределения по внутренней энергии молекул (вращательной, колебательной, электронной), числовые плотности продуктов реакций $n_i = n_i(T, n_d)$ являются термодинамическими функциями от T и числовых плотностей непревращающихся частиц n_d .

Газодинамические переменные: n_d , \mathbf{v} и T .

Система уравнений

Система уравнений (8.10) для непревращающихся частиц, уравнение движения (8.23) с учетом формулы (8.31), уравнение баланса внутренней энергии в форме (8.4)

$$\rho \frac{d}{dt} u^{\text{eq}} + [(p - \varsigma \nabla \cdot \mathbf{v}) \delta - 2\eta \mathbf{S}] : \nabla \mathbf{v} + \nabla \cdot \mathbf{q} + \sum_i \rho_i \mathbf{V}_i \cdot \mathbf{F}_i = 0, \quad (8.32)$$

где величина u^{eq} выражается через n_d и T с применением термодинамических соотношений для смеси реагирующих газов.

Переносные свойства

Различие с п. 8.3.2 состоит в том, что при определении выражений для коэффициентов переноса и векторных переносных свойств для продуктов реакций плотности n_i заменяются на термодинамические функции $n_i(T, n_d)$. Поправка Гиршфельдера–Эйкена имеет тот же вид.

Различные формы уравнений газодинамики для данного случая приведены в монографии [5].

8.3.4. Модель с колебательной релаксацией

Д о п у щ е н и я

1. Возбуждены вращательные и колебательные степени свободы, электронные степени свободы и химические реакции заморожены, поэтому индекс $\alpha = \alpha_R \alpha_V$.

2. Вращательная и колебательная энергии частиц не зависят от колебательных и вращательных уровней соответственно, т. е. $E_{i\alpha_R \alpha_V}^{\text{rot}} = E_{i\alpha_R}$, $E_{i\alpha_R \alpha_V}^{\text{vib}} = E_{i\alpha_V}$.

3. Время вращательной релаксации τ_{Ri} мало по сравнению с газодинамическим временем t_* : $\max \tau_{Ri} \equiv \tau_R \ll t_*$.

4. Время колебательной релаксации составляет величину порядка t_* .

5. Медленными переменными являются заселенности колебательных уровней $n_{i\alpha_V}$.

Вывод системы уравнений

1. Решение системы уравнений (8.1) в приближении Эйлера в виде ряда

$$n_{i\alpha} = n_{i\alpha_V} (z_{i\alpha}^{(0)} + \varepsilon z_{i\alpha}^{(1)} + \dots); \quad \sum_{\alpha_R} z_{i\alpha}^{(1)} = 0; \quad \alpha = \alpha_R \alpha_V; \quad \varepsilon = \frac{\tau_R}{t_*}.$$

2. Система уравнений нулевого приближения

$$K_{i\alpha_R \alpha_V}^{\text{rot}} = 0, \quad (8.33)$$

в которой учтены только слагаемые с RT и RR-обменами.

3. Решением этой системы уравнений является локально-равновесное распределение по вращательной энергии $z_{i\alpha}^{(0)} = z_{i\alpha_R}^{\text{eq}}(T_t)$.

4. Вычисление $z_{i\alpha}^{(1)}$ с использованием уравнений для $n_{i\alpha_V}$ и энергии в приближении Эйлера.

5. Введение поступательно-вращательной температуры T вместо T_t . При этом

$$\mathcal{E} = \frac{3}{2} kT + \mathcal{E}_R^{\text{eq}} + \mathcal{E}_V. \quad (8.34)$$

6. Величина $\varepsilon z_{i\alpha}^{(1)}$ дает вклад в дивергенцию тензора давлений

$$P = p - \varsigma \nabla \mathbf{v} + p_{\text{rel}}; \quad p = nkT. \quad (8.35)$$

Более полная иллюстрация метода представлена в п. 8.4.2.

Газодинамические переменные: n_i , $y_{i\alpha_V}$, \mathbf{v} и T .

Система уравнений

Система уравнений (8.22), система уравнений баланса относительных заселенностей колебательных уровней $y_{i\alpha_V}$

$$n_i \frac{dy_{i\alpha_V}}{dt} + \nabla \cdot n_i y_{i\alpha_V} \mathbf{V}_{i\alpha_V} - y_{i\alpha_V} \nabla \cdot n_i \mathbf{V}_i = \sum_{\alpha_R} K_{i\alpha}, \quad (8.36)$$

уравнение движения (8.23) и уравнение баланса внутренней энергии (8.4), где P и \mathcal{E} даются формулами (8.35) и (8.34) соответственно.

Уравнение (8.36) находится суммированием уравнения (8.8) по α_R .

Обозначения

ς — коэффициент объемной вязкости

p_{rel} — релаксационное давление

Определения

Вращательная энергия

$$\mathcal{E}_R^{\text{eq}} = \sum_{i\alpha_R} x_i y_{i\alpha_R}^{\text{eq}}(T) E_{i\alpha_R}.$$

Колебательная энергия

$$\mathcal{E}_V = \sum_{i\alpha_V} x_i y_{i\alpha_V} E_{i\alpha_V}.$$

Относительная заселенность колебательных уровней

$$y_{i\alpha_V} = \sum_{\alpha_R} y_{i\alpha_R \alpha_V}.$$

Колебательная диффузионная скорость

$$\mathbf{V}_{i\alpha_V} = \frac{1}{y_{i\alpha_V}} \sum_{\alpha_R} y_{i\alpha} \mathbf{V}_{i\alpha}.$$

Переносные свойства и источниковые слагаемые

Колебательная диффузионная скорость

$$\mathbf{V}_{i\alpha_V} = \mathbf{V}_i - \frac{\sigma_i}{n_i} \nabla \ln y_{i\alpha_V}. \quad (8.37)$$

Система уравнений баланса относительных заселенностей колебательных уровней

$$n_i \frac{dy_{i\alpha_V}}{dt} + n_i \mathbf{V}_i \cdot \nabla y_{i\alpha_V} - \nabla \cdot \sigma_i \nabla y_{i\alpha_V} = \sum_{\alpha_R} K_{i\alpha}. \quad (8.38)$$

Поправка Гиршфельдера–Эйкена

$$\begin{aligned} \delta q &= - \sum_i \sigma_i c_{vi}^R \nabla T - \sum_i \sigma_i \nabla \sum_{\alpha_V} E_{i\alpha_V} y_{i\alpha_V}, \\ c_{vi}^R(T) &= \frac{d}{dT} \sum_{\alpha_R} E_{i\alpha_R} y_{i\alpha_R}^{\text{eq}}(T), \end{aligned} \quad (8.39)$$

где c_{vi}^R — удельная теплоемкость при постоянном объеме компонента i , обусловленная вращениями частиц.

Комментарии

1. Выражение (8.37) для колебательной диффузионной скорости получено следующим образом. Всюду поступательная температура T_t заменяется на температуру T . В формулах для источниковых слагаемых $K_{i\alpha_V}$ вместо относительной заселенности $y_{i\alpha}$ подставляется выражение $y_{i\alpha_R}^{\text{eq}}(T) y_{i\alpha_V}$.

2. В принятых здесь приближениях уравнение (8.36) примет вид (8.38), а поправка Эйкена — вид (8.39).

8.3.5. Модель с многотемпературной колебательной кинетикой смеси газов двухатомных молекул

Допущения

1. К быстрым процессам кроме RT- и RR-обменов (п. 8.3.4) относятся резонансные обмены VV_1 колебательной энергией между молекулами одного и того же сорта, обмены колебательной энергией между молекулами разных сортов являются медленным процессом.

2. Колебания молекул моделируются гармоническими осцилляторами.

Вывод системы уравнений

1. В безразмерном виде правая часть уравнения (8.36) равна $R + Q$. Величина R обусловлена VV_1 -обменами, она порядка $1/\tau_V^*$, где $\tau_V^* = \tau_{VV_1}/t_* \ll 1$, τ_{VV_1} — время релаксации рассматриваемого резонансного процесса. Величина Q , обусловленная VT-обменами, порядка единицы.

2. Решение системы уравнений (8.36) имеет вид ряда по τ_V^* .

3. В нулевом приближении получается система уравнений $R = 0$. Решение: $y_{i\alpha_V}^{(0)} = y_{i\alpha_V}(T_{Vi})$ — больцмановская функция, в которой температура T заменена на колебательную температуру молекул компонента i T_{Vi} (см. модель V.2, введение [2], а также [8]).

Газодинамические переменные

Различие с моделью, изложенной в п. 8.3.4: вместо $y_{i\alpha_V}$ медленными переменными являются величины колебательной энергии компо-

нентов смеси

$$e_{iV} = \sum_{\alpha_V} y_{i\alpha} E_{i\alpha_V}.$$

Система уравнений

Различия с моделью, изложенной в п. 8.3.4: вместо системы уравнений (8.36) используется система уравнений баланса колебательной энергии компонентов смеси

$$n_i \frac{de_{iV}}{dt} - e_{iV} \nabla \cdot n_i \mathbf{V}_i + \nabla \cdot n_i \sum_{\alpha_V} y_{i\alpha_V} E_{i\alpha_V} \mathbf{V}_{i\alpha_V} = \sum_{\alpha} E_{i\alpha_V} K_{i\alpha}, \quad (8.40)$$

которая получается путем умножения уравнения (8.36) на $E_{i\alpha_V}$ с последующим суммированием по α_V .

В формуле (8.34) для внутренней энергии, отнесенной к числу частиц, величина $\mathcal{E}_V = \sum_i x_i e_{iV}$.

Комментарии

1. Различие с п. 8.3.4: в правых частях уравнений (8.40) вместо $y_{i\alpha_V}$ подставляется $y_{i\alpha_V}(T_{Vi})$. В рассматриваемом приближении для третьего слагаемого левой части уравнения (8.40) имеет место равенство

$$\sum_{\alpha_V} y_{i\alpha_V} E_{i\alpha_V} \mathbf{V}_{i\alpha_V} = e_{iV} \mathbf{V}_i - \frac{\sigma_i}{n_i} c_{vi}^V \nabla T_{Vi},$$

$$c_{vi}^V(T_{Vi}) = \frac{d}{dT_{Vi}} \sum_{\alpha_V} E_{i\alpha_V} y_{i\alpha_V}(T_{Vi}),$$

с учетом которого вместо уравнения (8.40) получается уравнение

$$n_i \frac{de_{iV}}{dt} + n_i \mathbf{V}_i \cdot \nabla e_{iV} - \nabla \cdot \sigma_i c_{vi}^V \nabla T_{Vi} = \sum_{\alpha} E_{i\alpha_V} K_{i\alpha},$$

где $c_{vi}^V = c_{vi}^V(T_{Vi})$ — удельная теплоемкость при постоянном объеме компонента i , обусловленная колебаниями частиц.

2. Поправка Гиршфельдера–Эйкена (8.21) в данном случае приобретает вид

$$\delta q = - \sum_i \sigma_i c_{vi}^R(T) \nabla T - \sum_i \sigma_i c_{vi}^V(T_{Vi}) \nabla T_{Vi}.$$

3. Дивергенция тензора напряжений дается формулой (8.35), однако коэффициент объемной вязкости, релаксационное давление и температура T определяются с учетом того, что резонансные обмены колебательной энергией между молекулами одного и того же сорта относятся к быстрым процессам.

4. Большое число скалярных газодинамических переменных $y_{i\alpha_V}$ заменяется меньшим набором переменных — колебательными темпе-

ратурами T_{Vi} . В соответствии с этим сокращается число уравнений в системе уравнений газодинамики.

8.4. Модели с релаксацией вращательной и колебательной энергии

Назначение

1. Более полное изложение методов п.8.3.2 и 8.3.4 на простых примерах.

2. Приближенная теория объемной вязкости и релаксационного давления.

Допущения

1. Газ состоит из двухатомных молекул (индекс i опускается).

2. Справедливы релаксационные модели баланса вращательной и колебательной энергии.

3. Пренебрегается динамической вязкостью, теплопроводностью и диффузией (приближение Эйлера).

Более подробное изложение дано в [9].

8.4.1. Модель с релаксацией вращательной энергии

Допущения

1. Возбуждены только вращения молекул ($\alpha = \alpha_R$)

2. Справедлива модель R.4 (см. введение, [2]), согласно которой система уравнений баланса заселенностей заменяется на уравнение баланса вращательной энергии ε_R

$$\frac{d\varepsilon_R}{dt} = \frac{\varepsilon_R^{\text{eq}}(T_t) - \varepsilon_R}{\tau_R}, \quad \varepsilon_R = \frac{1}{n} \sum_{\alpha_R} n_{\alpha_R} E_{\alpha_R}. \quad (8.41)$$

3. Время вращательной релаксации τ_R много меньше характерного времени течения t_* ($\tau_R/t_* \ll 1$).

Метод решения уравнения (8.41)

Решение уравнения (8.41) представляется в виде ряда по $\tau_R^* = \tau_R/t_*$

$$\varepsilon_R = \varepsilon_R^{(0)} + \tau_R^* \varepsilon_R^{(1)} + \dots \quad (8.42)$$

Нулевое приближение

$$\varepsilon_R^{(0)} = \varepsilon_R^{\text{eq}}(T_t). \quad (8.43)$$

Для нахождения $\varepsilon_R^{(1)}$ в левую часть уравнения (8.41) вместо ε_R подставляется выражение (8.43), используется уравнение баланса внутренней энергии (8.4) в приближении Эйлера

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{3}{2} kT_t + \varepsilon_R^{\text{eq}}(T_t) \right) + kT_t \nabla \cdot \mathbf{v} = 0.$$

В результате:

$$-\frac{1}{t^*} \mathcal{E}_R^{(1)} = \frac{1}{n} \frac{dn \mathcal{E}_R^{\text{eq}}(T_t)}{dt} + \mathcal{E}_R^{\text{eq}}(T_t) \nabla \cdot \mathbf{v} = c_v^R \frac{dT_t}{dt} = -A \nabla \cdot \mathbf{v}, \quad (8.44)$$

где

$$A = k T_t c_v^R \left(\frac{3}{2} k + c_v^R \right)^{-1}; \quad c_v^R = \frac{d\mathcal{E}_R^{\text{eq}}(T_t)}{dT_t}.$$

Внутренняя энергия, отнесенная к числовой плотности, равна

$$\mathcal{E} = \frac{3}{2} k T_t + \mathcal{E}_R^{\text{eq}}(T_t) + \tau_R A \nabla \cdot \mathbf{v} + \dots \quad (8.45)$$

Комментарий

Слагаемое формулы (8.45), пропорциональное $\nabla \cdot \mathbf{v}$, есть релаксационный вклад во внутреннюю энергию газа.

Обозначения

\mathcal{E}_R — вращательная энергия молекул газа

$\mathcal{E}_R^{\text{eq}}$ — равновесное значение вращательной энергии молекул газа

c_v^R — удельная теплоемкость при постоянном объеме, обусловленная вращениями молекул

τ_R, τ_V — времена вращательной и колебательной релаксации

\mathcal{E}_V — колебательная энергия молекул газа

$\mathcal{E}_V^{\text{eq}}$ — равновесное значение колебательной энергии молекул газа

ς — коэффициент объемной вязкости

p_{rel} — релаксационное давление

Определения

Поступательно-вращательная температура T определяется с тем условием, что вместо выражения (8.45) с погрешностью $O(\tau_R^{*2})$ внутренняя энергия частицы газа вычисляется по формуле

$$\mathcal{E} = \frac{3}{2} k T + \mathcal{E}_R^{\text{eq}}(T). \quad (8.46)$$

Представление поступательной температуры T_t через T в виде ряда по τ_R^*

$$T_t = T + \tau_R^* T^{(1)} + \dots \quad (8.47)$$

Второй член разложения (8.47)

$$\tau_R^* T^{(1)} = -\frac{1}{nk} \varsigma \nabla \cdot \mathbf{v}. \quad (8.48)$$

Коэффициент объемной вязкости

$$\varsigma = nk^2 T \tau_R c_v^R(T) \left[\frac{3}{2} k + c_v^R(T) \right]^{-2}. \quad (8.49)$$

След (дивергенция) тензора давлений

$$P = nkT_t = p - \varsigma \nabla \cdot \mathbf{v}; \quad p = nkT. \quad (8.50)$$

Комментарий

Объемная вязкость характеризует разность поступательной и поступательно-вращательной температур [9–11] на основе выражений (8.47), (8.48).

8.4.2. Модель с вращательно-колебательной релаксацией

Допущения

1. Возбуждены вращения и колебания ($\alpha = \alpha_R \alpha_V$).
2. Вращательная и колебательная энергии молекулы не зависят от колебательных и вращательных уровней соответственно, т. е. $E_{\alpha_R \alpha_V}^{\text{rot}} = E_{\alpha_R}$, $E_{\alpha_R \alpha_V}^{\text{vib}} = E_{\alpha_V}$.

3. Для вращательной энергии справедливо уравнение (8.41), для колебательной энергии ε_V — приближенное релаксационное уравнение

$$\frac{d\varepsilon_V}{dt} = \frac{\varepsilon_V^{\text{eq}}(T_t) - \varepsilon_V}{\tau_V}. \quad (8.51)$$

4. Внутренняя энергия равна

$$\varepsilon = \frac{3}{2} kT_t + \varepsilon_R + \varepsilon_V; \quad \varepsilon_V = \frac{1}{n} \sum_{\alpha} n_{\alpha} E_{\alpha_V}. \quad (8.52)$$

5. Как и в модели, изложенной в п. 8.4.1, $\tau_R/t_* \ll 1$, однако время колебательной релаксации порядка t_* , т. е. $\tau_V/t_* \sim 1$.

Метод решения уравнения (8.41)

Решение уравнения (8.41) для вращательной энергии следует искать в виде ряда (8.42). Первый член ряда дается формулой (8.43). Следующее слагаемое определяется с учетом уравнения баланса внутренней энергии и соотношений (8.51), (8.52). В результате для $\varepsilon_R^{(1)}$ имеет место выражение (вместо (8.44))

$$-\frac{1}{t_*} \varepsilon_R^{(1)} = c_v^R \frac{dT_t}{dt} = -c_v^R \left(\frac{3}{2} k + c_v^R(T_t) \right)^{-1} \left(kT_t \nabla \cdot \mathbf{v} + \frac{\varepsilon_V^{\text{eq}}(T_t) - \varepsilon_V}{\tau_V} \right).$$

Переход к поступательно-вращательной температуре T аналогичен указанному в п. 8.4.1.

Внутренняя энергия равна

$$\varepsilon = \frac{3}{2} kT + \varepsilon_R^{\text{eq}}(T) + \varepsilon_V. \quad (8.53)$$

Переносные свойства

След тензора давлений

$$P = p - \varsigma \nabla \cdot \mathbf{v} + p_{\text{rel}}; \quad p = nkT. \quad (8.54)$$

Коэффициент объемной вязкости ς определяется формулой (8.49).

Релаксационное давление

$$p_{\text{rel}} = -\frac{\varsigma}{kT} \frac{\mathcal{E}_V^{\text{eq}}(T) - \mathcal{E}_V}{\tau_V}. \quad (8.55)$$

Комментарии

1. Релаксационное давление равно нулю в отсутствие вращений ($\mathcal{E}_R = 0$) или колебаний ($\mathcal{E}_V = 0$), а также при колебательном равновесии ($\mathcal{E}_V^{\text{eq}} = \mathcal{E}_V$) [9–12].

2. При определении температуры по поступательным степеням свободы ($T = T_t$) дивергенция (след) тензора давлений равен $P = nkT_t$, а величины, пропорциональные объемной вязкости и релаксационному давлению, входят в выражение для внутренней энергии газа.

3. При использовании уравнений Навье–Стокса в газодинамике [5, 13, 14] объемная вязкость и релаксационное давление обычно не учитываются. При таком допущении поступательная и поступательно-вращательная температуры одинаковы.

4. Вопросы определения температуры и значимости объемной вязкости обсуждаются в работе [9], где даны ссылки на соответствующую литературу.

Список литературы к главе 8

1. Седов Л. И. Механика сплошной среды. Т. 1. — М.: Наука, 1973. — 536 с.
2. Нигматулин Р. И. Основы механики гетерогенных сред. — М.: Наука, 1978. — 336 с.
3. Жермен П. Курс механики сплошных сред. Общая теория. — М.: Высш. школа, 1983. — 399 с.
4. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Гидродинамика. — М.: Наука, 1986. — 736 с.
5. Пилюгин Н. Н., Тирский Г. А. Динамика ионизованного излучающего газа. — М.: Изд-во Моск. гос. ун-та, 1989. — 310 с.
6. Галкин В. С., Лосев С. А. Уравнения релаксационной газодинамики // Электронный журнал «Физико-химическая кинетика в газовой динамике». www.chemphys.edu.ru/pdf/2008-02-01-001/pdf.
7. Галкин В. С., Лосев С. А. Систематизация уравнений релаксационной газодинамики // Изв. РАН. МЖГ. 2010. № 4. С. 183–189.
8. Гордиец Б. Ф., Осипов А. И., Шелепин Л. А. Кинетические процессы в газах и молекулярные лазеры. — М.: Наука, 1980. — 512 с.
9. Галкин В. С., Русаков С. В. К теории объемной вязкости и релаксационного давления // ПММ. 2005. Т. 69, вып. 6. С. 1062–1075.
10. Жданов В. М., Алиевский М. Я. Процессы переноса и релаксации в молекулярных газах. — М.: Наука, 1989. — 332 с.
11. Нагнибеда Е. А., Кустова Е. В. Кинетическая теория процессов переноса и релаксации в потоках неравновесных реагирующих газов. — СПб.: Изд-во СПбГУ, 2004. — 270 с.

12. Коган М. Н. Динамика разреженного газа. — М.: Наука, 1967. — 440 с.
13. Беркут В. Д., Дорошенко В. М., Ковтун В. В., Кудрявцев Н. Н. Неравновесные физико-химические процессы в гиперзвуковой аэродинамике. — М.: Энергоатомиздат, 1994. — 399 с.
14. Осипов А. И., Уваров А. В. Кинетические и газодинамические процессы в неравновесной молекулярной физике // УФН. 1992. Т. 162, № 11. С. 1–42.

Глава 9

ПЕРЕНОСНЫЕ СВОЙСТВА ГАЗОВ ПРИ СИЛЬНОМ ОТКЛОНЕНИИ ОТ ЛОКАЛЬНОГО РАВНОВЕСИЯ

Данная глава посвящена кинетической теории переносных свойств при сильных отклонениях от больцмановского распределения по тем или иным видам внутренней энергии молекул или от химического равновесия. Сильное отклонение имеет место, если время релаксации некоторых неупругих процессов много больше времени поступательной релаксации и порядка характерного газодинамического времени. Наиболее разработаны приложения модифицированного метода Чепмена–Энскога, который применим, если указанное соотношение времен релаксации не меняется в рассматриваемой области течения. Для решения задач, в которых соотношение времен релаксации переменнo в поле течения, разработан обобщенный метод Чепмена–Энскога. Он дает возможность экономного и наглядного рассмотрения частных случаев. Поэтому глава начинается с краткого описания особенностей и результатов обобщенного метода Чепмена–Энскога. В п. 9.2.3 кратко демонстрируется специфика применения модифицированного метода Чепмена–Энскога для бинарной смеси атомарных газов с резко различающимися массами частиц, когда справедлива двухтемпературная газодинамика.

9.1. Обобщенный метод Чепмена–Энскога

Назначение метода

Вычисление выражений для переносных свойств молекулярных реагирующих газов при произвольных соотношениях скоростей неупругих процессов [1–12]. Обоснование и уточнение методики гл. 8.

Д о п у щ е н и я

1. Характерные отношения времени поступательной релаксации к временам релаксации неупругих процессов θ_r меняются в поле течения: $K_n \leq \theta_r \leq 1$.

2. Оператор столкновений $J_{i\alpha}^{\text{di}}$, приводящих к диссоциации и рекомбинации, не учитывается.

3. Оператор упругих столкновений $J_{i\alpha}^{\text{el}}$ больше или порядка оператора неупругих столкновений $\sum_r J_{i\alpha}^r = J_{i\alpha}^{\text{in}} + J_{i\alpha}^{\text{bi}}$ (выражения для операторов столкновений даны формулами (3.18), (3.19)).

Система кинетических уравнений в безразмерной форме

$$\text{Kn } D_{i\alpha}^* (f_{i\alpha}^*) = J_{i\alpha}^{\text{el}*} + \sum_r \theta_r J_{i\alpha}^{r*}. \quad (9.1)$$

Обозначения

r — индекс, обозначающий вид неупругого столкновения

$J_{i\alpha}^{r*}$ — безразмерный оператор неупругих столкновений вида r

$J_{i\alpha}^0$ — оператор неупругих столкновений, рассчитанный при $f = f^{(0)}$

$L_{i\alpha}$ — линейризованный и симметризованный оператор столкновений

$f_{i\alpha}^{(0)}$ — функция распределения в нулевом (по числу Кнудсена Kn) приближении (первый член разложения f в ряд по степеням числа Kn)

$f_{i\alpha}^{(0)} + f_{i\alpha}^{(1)}$ — функция распределения в первом (по числу Kn) приближении

$f_{i\alpha}^{(1)}$ — второй член разложения f в ряд по степеням числа Kn (поправка к $f_{i\alpha}^{(0)}$)

$\varphi_{i\alpha}$ — возмущение функции распределения (отношение $f_{i\alpha}^{(1)}$ к $f_{i\alpha}^{(0)}$)

$\varphi_{i\alpha}^{(\text{I})}$ — возмущение функции распределения, тензорное по собственной скорости частиц \mathbf{C}_i

$\varphi_{i\alpha}^{(\text{II})}$ — возмущение функции распределения, векторное по \mathbf{C}_i

$\varphi_{i\alpha}^{(\text{III})}$ — возмущение функции распределения, скалярное по \mathbf{C}_i

Kn — число Кнудсена, в данной главе оно полагается равным по порядку величины отношению характерного времени поступательной релаксации к характерному газодинамическому времени

$K_{i\alpha}$ — производство частиц компонента i в состоянии с набором квантовых чисел α в результате переходов между уровнями энергии и химических реакций (правая часть уравнения (8.1))

$K_{i\alpha}^{(0)}$ — значение $K_{i\alpha}$, вычисленное при условии $f_{i\alpha} = f_{i\alpha}^{(0)}$

$K_{i\alpha}^{(1)}(\varphi_{i\alpha}^{(\text{III})})$ — поправка к значению $K_{i\alpha}^{(0)}$, вычисленная при условии $f_{i\alpha}^{(1)} = f_{i\alpha}^{(0)} \varphi_{i\alpha}^{(\text{III})}$

9.1.1. Функция распределения в нулевом и первом приближении

Функция распределения в нулевом приближении

$$f_{i\alpha}^{(0)} = n_{i\alpha} \left(\frac{m_i}{2\pi k T_t} \right)^{3/2} \exp(-W_{ti}^2), \quad (9.2)$$

$$W_{ti}^2 = \frac{m_i C_i^2}{2k T_t}; \quad T_t = \frac{1}{3nk} \sum_{i\alpha} m_i \int C_i^2 f_{i\alpha}^{(0)} d\mathbf{C}_i.$$

Комментарии

1. С использованием системы уравнений баланса заселенностей (уравнение (8.1)) доказывается, что сумма $\sum_n \theta_n J_{i\alpha}^{n*}$, рассчитанная при условии $f_{i\alpha} = f_{i\alpha}^{(0)}$, по порядку величины равна числу Kn (см. обзоры [2, 9]). Тогда в нулевом приближении по числу Kn справедлива система уравнений $J_{i\alpha}^{\text{el}} = 0$, решением которой являются максвелловские функции (9.2). Такой же результат получается при использовании H -теоремы [3].

2. В приближении Эйлера $\mathbf{V}_{i\alpha}^{(0)} = 0$, $\boldsymbol{\pi}^{(0)} = 0$, $\mathbf{q}^{(0)} = 0$.

Газодинамические переменные: $n_{i\alpha}$, \mathbf{v} , T_t .

Система уравнений переноса

Уравнения баланса заселенностей

$$\frac{dn_{i\alpha}}{dt} + n_{i\alpha} \nabla \cdot \mathbf{v} + \nabla \cdot n_{i\alpha} \mathbf{V}_{i\alpha} = K_{i\alpha}.$$

Уравнение движения

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} + \nabla P + \nabla \cdot \boldsymbol{\pi} - \sum_i \rho_i \mathbf{F}_i = 0; \quad \boldsymbol{\Pi} = \boldsymbol{\pi} + P\delta$$

или

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} + \nabla \cdot \boldsymbol{\Pi} - \sum_i \rho_i \mathbf{F}_i = 0. \quad (9.3)$$

Уравнения баланса внутренней энергии

$$\rho \frac{du}{dt} + \boldsymbol{\Pi} : \nabla \mathbf{v} + \nabla \cdot \mathbf{q} - \sum_i \rho_i \mathbf{V}_i \cdot \mathbf{F}_i = 0$$

или

$$\frac{dn\mathcal{E}}{dt} + n\mathcal{E} \nabla \cdot \mathbf{v} + \boldsymbol{\Pi} : \nabla \mathbf{v} + \nabla \cdot \mathbf{q} - \sum_i \rho_i \mathbf{F}_i \cdot \mathbf{V}_i = 0.$$

Функция распределения в первом приближении

$$f_{i\alpha} = f_{i\alpha}^{(0)} + f_{i\alpha}^{(1)}.$$

Представление поправки $f_{i\alpha}^{(1)}$ через возмущение $\varphi_{i\alpha}$

$$f_{i\alpha}^{(1)} = f_{i\alpha}^{(0)} \varphi_{i\alpha}, \quad \varphi_{i\alpha} = \varphi_{i\alpha}^{(\text{I})} + \varphi_{i\alpha}^{(\text{II})} + \varphi_{i\alpha}^{(\text{III})}.$$

Система уравнений для возмущения функции распределения $\varphi_{i\alpha}$

$$L_{i\alpha}(\varphi_{i\alpha}) = D_{i\alpha} f_{i\alpha}^{(0)} - J_{i\alpha}^0; \quad D_{i\alpha} f_{i\alpha}^{(0)} \equiv \frac{\partial_0 f_{i\alpha}^{(0)}}{\partial t} + \mathbf{c}_i \cdot \nabla f_{i\alpha}^{(0)} + \mathbf{F}_i \cdot \nabla_c f_{i\alpha}^{(0)}$$

или (после записи в явном виде оператора $D_{i\alpha} f_{i\alpha}^{(0)}$)

$$L_{i\alpha}(\varphi) = f_{i\alpha}^{(0)} \left\{ \frac{m_i}{kT_t} \left(\mathbf{C}_i \mathbf{C}_i - \frac{1}{3} \delta C_i^2 \right) : \nabla \mathbf{v} + \mathbf{C}_i \cdot \frac{n}{n_{i\alpha}} \mathbf{d}_{i\alpha} + \right. \\ \left. + \left(W_{ti}^2 - \frac{5}{2} \right) \mathbf{C}_i \cdot \nabla \ln T_t + G_{i\alpha} \right\}, \quad (9.4)$$

$$G_{i\alpha} = \frac{d_0 \ln n_{i\alpha}}{dt} + \nabla \cdot \mathbf{v} + \frac{1}{kT_t} \left(1 - \frac{2}{3} W_{ti}^2 \right) \sum_{j\beta} E_{j\beta} \frac{d_0}{dt} \frac{n_{j\beta}}{n} - \frac{J_{i\alpha}^0}{f_{i\alpha}^{(0)}}. \quad (9.5)$$

Окончательный вид выражения (9.5) дан в п. 9.1.4.

Определения

Линеаризованный и симметризованный оператор столкновений

$$L_{i\alpha}(\varphi) = L_{i\alpha}^{\text{el}}(\varphi) + L_{i\alpha}^{\text{S}}(\varphi). \quad (9.6)$$

Линеаризованный оператор упругих столкновений

$$L_{i\alpha}^{\text{el}}(\varphi) = \sum_{j\beta} \int f_{i\alpha}^{(0)} f_{j\beta}^{(0)} (\varphi'_{i\alpha} + \varphi'_{j\beta} - \varphi_{i\alpha} - \varphi_{j\beta}) g_{ij} \sigma_{i\alpha j\beta}^{i\alpha j\beta} d\Omega d\mathbf{c}_j.$$

Симметричная часть линеаризованного оператора неупругих столкновений

$$L_{i\alpha}^{\text{S}}(\varphi) = L_{i\alpha}^{\text{inS}}(\varphi) + L_{i\alpha}^{\text{biS}}(\varphi).$$

Линеаризованный и симметризованный оператор упругих и неупругих столкновений в отсутствие химических реакций

$$L_{i\alpha}(\varphi) \equiv L_{i\alpha}^{\text{el}}(\varphi) + L_{i\alpha}^{\text{inS}}(\varphi) \equiv \sum_{\omega} \int \frac{1}{2} \left[\frac{\theta_{i\alpha j\beta}}{\theta_{i\gamma j\delta}} f_{i\gamma}^{(0)'} f_{j\delta}^{(0)'} + f_{i\alpha}^{(0)} f_{j\beta}^{(0)} \right] \times \\ \times \left(\varphi'_{i\gamma} + \varphi'_{j\delta} - \varphi_{i\alpha} - \varphi_{j\beta} \right) g_{ij} \sigma_{i\alpha j\beta}^{i\gamma j\delta} d\Omega d\mathbf{c}_j, \quad (9.7)$$

$\omega = j\beta\gamma\delta$, $\theta_{i\alpha j\beta} = S_{i\alpha} S_{j\beta}$, $d\Omega$ — элементарный телесный угол.

Линеаризованный и симметризованный оператор упругих и неупругих столкновений при наличии бимолекулярных химических реакций

$$L_{i\alpha}(\varphi) \equiv L_{i\alpha}^{\text{el}}(\varphi) + L_{i\alpha}^{\text{inS}}(\varphi) + L_{i\alpha}^{\text{biS}}(\varphi) \equiv \\ \equiv \sum_{\kappa} \int \frac{1}{2} \left[\frac{\Theta_{i\alpha j\beta}}{\Theta_{k\gamma l\delta}} f_{k\gamma}^{(0)'} f_{l\delta}^{(0)'} + f_{i\alpha}^{(0)} f_{j\beta}^{(0)} \right] \times \\ \times (\varphi'_{k\gamma} + \varphi'_{l\delta} - \varphi_{i\alpha} - \varphi_{j\beta}) g_{ij} \sigma_{i\alpha j\beta}^{k\gamma l\delta} d\Omega d\mathbf{c}_j, \quad (9.8) \\ \kappa = j\beta k\gamma l\delta; \quad \Theta_{i\alpha j\beta} = S_{i\alpha} S_{j\beta} m_i^3 m_j^3.$$

Термодинамическая диффузионная сила

$$\mathbf{d}_{j\beta} = \nabla \frac{n_{j\beta}}{n} + \left(\frac{n_{j\beta}}{n} - \frac{\rho_{j\beta}}{\rho} \right) \nabla \ln p - \frac{\rho_{j\beta}}{p} \left(\mathbf{F}_j - \sum_k \frac{\rho_k}{\rho} \mathbf{F}_k \right) = y_{j\beta} \mathbf{d}_j + x_j \nabla y_{j\beta}.$$

Термодинамическая сила химического компонента j

$$\mathbf{d}_j = \nabla x_j + (x_j - \alpha_j) \nabla \ln p - \frac{\rho_j}{p} \left(\mathbf{F}_j - \sum_k \alpha_k \mathbf{F}_k \right); \quad p = nkT_t.$$

Комментарии

1. Верхний индекс β показывает, что этот интеграл столкновений относится к бимолекулярным химическим реакциям.

2. Для вывода оператора неупругих столкновений в отсутствие химических реакций (9.7) в формуле (9.8) индексы k, l заменяются на индексы i, j , а суммирование по κ — на суммирование по ω .

3. Метод обусловлен необходимостью единого описания газодинамического процесса, в различных областях которого степень возбуждения внутренних степеней свободы сильно различается. Примеры — описание поля возмущенного течения около гиперзвукового летательного аппарата, процессы в газодинамических лазерах и т. д.

4. В отличие от классического (гл. 4) и модифицированного (разд. 9.2) методов Чепмена–Энскога, выражение (9.2) для функций распределения $f_{i\alpha}^{(0)}$ сначала постулируется, а не является точным решением системы кинетических уравнений нулевого приближения. Это постулирование определяется тем, что процесс поступательной релаксации является самым быстрым среди всех процессов в газовой динамике (см. введение, [2], глава Т). Количественное обоснование основано на оценках [2, 9] для условий $W_i^2 \sim 1$ и $\varepsilon_{i\alpha} \sim 1$ (как и возможность выделения оператора $L_{i\alpha}^S$).

5. Выражения для операторов упругих и неупругих столкновений даны формулами (3.18), (3.19). Величина $L_{i\alpha}(\varphi_{i\alpha})$ получается путем линеаризации оператора столкновений относительно локального максвелловского распределения (9.2). Линеаризованный оператор разбивается на симметричную ($L_{i\alpha}^S$) и антисимметричную части. Последней пренебрегается из-за ее малости [1, 2].

6. Выделение оператора $L_{i\alpha}^S$ обеспечивает самосопряженность интегральных частей уравнений (9.4). Следствием является выполнение принципа симметрии Онзагера для переносных свойств π , $\mathbf{V}_{i\alpha}$ и \mathbf{q} [1–7, 11]. В интегральных уравнениях модифицированного метода Чепмена–Энскога (разд. 9.2 данной главы) оператор $L(\varphi)$ — самосопряженный. В обобщенном методе [8] учитывается антисимметричная часть линеаризованного оператора неупругих столкновений, как и в методе [13–15].

7. С принятым способом определения нулевого приближения связана принципиальная особенность данного метода: существование различных вариантов вычисления газодинамических переменных [1–6, 9]. Если эти переменные вычисляются в рамках нулевого приближения (9.2), т.е. при условиях

$$\begin{aligned} n_{i\alpha} &= \int f_{i\alpha}^{(0)} d\mathbf{c}_i; \quad \mathbf{v} = \frac{1}{\rho} \sum_{i\alpha} m_i \int \mathbf{c}_i f_{i\alpha}^{(0)} d\mathbf{c}_i, \\ T_t &= \frac{1}{3nk} \sum_{i\alpha} m_i \int C_i^2 f_{i\alpha}^{(0)} d\mathbf{C}_i; \quad \int f_{i\alpha}^{(\xi)} d\mathbf{c}_i = 0, \\ \sum_{i\alpha} m_i \int \mathbf{c}_i f_{i\alpha}^{(\xi)} d\mathbf{c}_i &= 0; \quad \sum_{i\alpha} m_i \int C_i^2 f_{i\alpha}^{(\xi)} d\mathbf{C}_i = 0, \\ \xi &= 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (9.9)$$

(аналогичных требованиям (4.5)), то получаются сложные интегральные уравнения для поправок $f_{i\alpha}^{(1)}$ [3, 4]. Простейший вид интегральных уравнений (уравнения Фредгольма второго рода) реализуется, если вместо первого условия (9.9) потребовать

$$n_i = \sum_{\alpha} \int \tilde{f}_{i\alpha}^{(0)} d\mathbf{c}_i; \quad \sum_{\alpha} \int \tilde{f}_{i\alpha}^{(\xi)} d\mathbf{c}_i = 0; \quad \xi = 1, 2, \dots, \quad (9.10)$$

$$n_{i\alpha} = n_{i\alpha}^{(0)} + n_{i\alpha}^{(1)}; \quad n_{i\alpha}^{(0)} = \int \tilde{f}_{i\alpha}^{(0)} d\mathbf{c}_i; \quad n_{i\alpha}^{(1)} = \int \tilde{f}_{i\alpha}^{(1)} d\mathbf{c}_i \quad (9.11)$$

т.е. при помощи функции $\tilde{f}_{i\alpha}^{(0)}$ рассчитывать числовую плотность частиц компонента i , а заселенность $n_{i\alpha}$ представлять отрезком ряда по числу Kn (волной сверху определяются величины, полученные при использовании разложения $n_{i\alpha}$ в ряд; например, выражение для $\tilde{f}_{i\alpha}^{(0)}$ получается из формулы (9.2) заменой $n_{i\alpha}$ на $n_{i\alpha}^{(0)}$). Полученная таким способом система уравнений для $\tilde{f}_{i\alpha}^{(1)}$ следует из аналогичной системы, найденной при выполнении условий (9.9), если применить разложение (9.11) [4–6, 9] (см. п. 9.1.4).

8. В уравнениях для тензорной и векторной частей возмущений функций распределения, полученных при подходе (9.10), (9.11), и в соответствующих формулах для переносных свойств π , $\mathbf{V}_{i\alpha}$ и \mathbf{q} величины $n_{i\alpha}^{(0)}$ заменяются на $n_{i\alpha}$ с пренебрежимо малой погрешностью $O(\text{Kn}^2)$ при вычислении величины $(f_{i\alpha}^{(0)} + f_{i\alpha}^{(1)})/f_{i\alpha}^{(0)}$. В результате получаются соотношения п. 9.1.2.

9. Приведенная система оценок несправедлива при наличии интенсивных высокопороговых неупругих процессов ($\varepsilon_{i\alpha} \gg 1$) [5, 8, 15]. Обзор теоретических результатов по роли этих процессов дан в [16].

Они могут существенно влиять на диффузионные скорости $\mathbf{V}_{i\alpha}$ (вопрос об этом влиянии недостаточно изучен).

9.1.2. Переносные свойства

Назначение

Вывод выражений для переносных свойств π , $\mathbf{V}_{i\alpha}$ и \mathbf{q} и входящих в них коэффициентов переноса.

Системы уравнений для тензорной ($\varphi_{i\alpha}^{(I)}$) и векторной ($\varphi_{i\alpha}^{(II)}$) частей функции $\varphi_{i\alpha}$

$$L_{i\alpha}(\varphi_{i\alpha}^{(I)}) = f_{i\alpha}^{(0)} \left(\mathbf{C}_i \mathbf{C}_i - \frac{1}{3} \delta C_i^2 \right) : \nabla \mathbf{v}, \quad (9.12a)$$

$$\begin{aligned} L_{i\alpha}(\varphi_{i\alpha}^{(II)}) &= f_{i\alpha}^{(0)} \left\{ \mathbf{C}_i \cdot \frac{n}{n_{i\alpha}} \mathbf{d}_{i\alpha} + \left(W_{ti}^2 - \frac{5}{2} \right) \mathbf{C}_i \cdot \nabla \ln T_t \right\} \equiv \\ &\equiv f_{i\alpha}^{(0)} \left\{ \mathbf{C}_i \cdot \left(\frac{n}{n_i} \mathbf{d}_i + \nabla \ln y_{i\alpha} \right) + \left(W_{ti}^2 - \frac{5}{2} \right) \mathbf{C}_i \cdot \nabla \ln T_t \right\}. \end{aligned} \quad (9.12b)$$

Комментарий

О выводе систем уравнений (9.12a) и (9.12b) см. комментарий 8 в п. 9.1.1; индексы $i\alpha$ и $j\beta$ принимают все возможные значения.

Решение системы уравнений для функций $\varphi_{i\alpha}^{(I)}$

$$\varphi_{i\alpha}^{(I)} = -\frac{1}{n} B_{i\alpha} \left(\mathbf{C}_i \mathbf{C}_i - \frac{1}{3} \delta C_i^2 \right) : \nabla \mathbf{v}, \quad (9.13)$$

где функции $B_{i\alpha}$ удовлетворяют системе уравнений

$$\sum_{j\beta} \frac{n_{i\alpha} n_{j\beta}}{n^2} L_{i\alpha j\beta} \left[B \left(\mathbf{C}_i \mathbf{C}_i - \frac{1}{3} \delta C_i^2 \right) \right] = \frac{2}{n} f_{i\alpha}^{(0)} \left(\mathbf{W}_{ti} \mathbf{W}_{ti} - \frac{1}{3} \delta W_{ti}^2 \right).$$

Эта система уравнений аналогична системе (4.10).

d-представление решения для функций $\varphi_{i\alpha}^{(II)}$

$$\begin{aligned} \varphi_{i\alpha}^{(II)} &= -\frac{1}{n} A_{i\alpha} \mathbf{C}_i \cdot \nabla \ln T_t - \frac{1}{n} \sum_{j\beta} D_{i\alpha}^{j\beta} \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{d}_{j\beta} \equiv \\ &\equiv -\frac{1}{n} A_{i\alpha} \mathbf{C}_i \cdot \nabla \ln T_t - \frac{1}{n} \sum_{j\beta} D_{i\alpha}^{j\beta} \mathbf{C}_i \cdot (y_{j\beta} \mathbf{d}_j + x_j \nabla y_{j\beta}), \end{aligned} \quad (9.14)$$

где функции $A_{i\alpha}$ и $D_{i\alpha}^{j\beta}$ удовлетворяют системам уравнений

$$\sum_{j\beta} \frac{n_{i\alpha} n_{j\beta}}{n^2} I_{i\alpha j\beta}(A\mathbf{C}) = \frac{1}{n} f_{i\alpha}^{(0)} \left(W_{ti}^2 - \frac{5}{2} \right) \mathbf{C}_i,$$

$$\sum_{j\beta} \frac{n_{i\alpha} n_{j\beta}}{n^2} I_{i\alpha j\beta}(D^{k\gamma} \mathbf{C}) = \frac{1}{n_{i\alpha}} f_{i\alpha}^{(0)} \left(\delta_{ik} \delta_{\alpha\gamma} - \frac{\rho_{i\alpha}}{\rho} \right) \mathbf{C}_i$$

(аналогично системам (4.17)).

V-представление решения для функций $\varphi_{i\alpha}^{(\text{II})}$

$$\varphi_{i\alpha}^{(\text{II})} = \psi_{i\alpha} + \frac{m_i}{kT_t} \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{V}_{i\alpha}. \quad (9.15a)$$

Функции $\psi_{i\alpha}$ удовлетворяют условиям

$$\int f_{i\alpha}^{(0)} \psi_{i\alpha} \mathbf{C}_i d\mathbf{C}_i = 0.$$

Приближенное решение систем уравнений для функций $\psi_{i\alpha}$ дается формулой

$$\psi_{i\alpha} = -\frac{1}{n} \tilde{A}_{i\alpha} \mathbf{C}_i \cdot \nabla \ln T_t - \frac{1}{n} \sum_{j\beta} \tilde{D}_{i\alpha}^{j\beta} \mathbf{C}_i \cdot (\mathbf{V}_{j\beta} - \mathbf{V}_{i\alpha}), \quad (9.15b)$$

в которой коэффициенты \tilde{A} , \tilde{D} являются отрезками рядов по полиномам Сонина [10]. Развита также теория векторных соотношений переноса при использовании представления [17], когда новая зависимая переменная $\chi_{i\alpha}$ вводится следующим образом:

$$\varphi_{i\alpha}^{(\text{II})} = \chi_{i\alpha} + \frac{m_i}{kT_t} \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{V}_i$$

(т. е. вместо $\mathbf{V}_{i\alpha}$, как в (9.15a), входит \mathbf{V}_i). Такое представление удобно при анализе частных случаев.

Комментарий

V-представление решения для функций $\varphi_{i\alpha}^{(\text{II})}$ аналогично формуле (4.24).

Переносные свойства

Полный тензор напряжений

$$\mathbf{\Pi} = nkT_t \boldsymbol{\delta} - 2\eta \mathbf{S}, \quad \eta = \frac{1}{15n} \sum_{i\alpha} m_i \int f_{i\alpha}^{(0)} B_{i\alpha} C_i^4 d\mathbf{C}_i. \quad (9.16a)$$

Вектор диффузионной скорости частиц компонента i в состоянии с квантовыми числами α

$$\mathbf{V}_{i\alpha} = \frac{1}{n_{i\alpha}} \int f_{i\alpha}^{(0)} \varphi_{i\alpha}^{(\text{II})} \mathbf{C}_i d\mathbf{C}_i = - \sum_{j\beta} D_{i\alpha j\beta} \mathbf{d}_{j\beta} - D_{Ti\alpha} \nabla \ln T_t \equiv$$

$$\equiv - \sum_{j\beta} D_{i\alpha j\beta} (y_{j\beta} \mathbf{d}_j + x_j \nabla y_{j\beta}) - D_{Ti\alpha} \nabla \ln T_t, \quad (9.16b)$$

где

$$D_{i\alpha j\beta} = \frac{1}{3nn_{i\alpha}} \int f_{i\alpha}^{(0)} D_{i\alpha}^{j\beta} C_i^2 d\mathbf{C}_i, \quad D_{Ti\alpha} = \frac{1}{3nn_{i\alpha}} \int f_{i\alpha}^{(0)} A_{i\alpha} C_i^2 d\mathbf{C}_i.$$

Вектор диффузионной скорости частиц компонента i

$$\mathbf{V}_i = \frac{1}{n_i} \sum_{\alpha} n_{i\alpha} \mathbf{V}_{i\alpha}. \quad (9.16\text{в})$$

Соотношения Стефана–Максвелла при использовании представления (9.15)

$$\mathbf{d}_{i\alpha} = \sum_{j\beta} \alpha_{i\alpha j\beta} (\mathbf{V}_{j\beta} - \mathbf{V}_{i\alpha}) - k_{Ti\alpha} \nabla \ln T_t.$$

Вектор плотности полного теплового потока

$$\begin{aligned} \mathbf{q} &= \sum_{i\alpha} \int f_{i\alpha}^{(1)} \left(\frac{m_i}{2} C_i^2 + E_{i\alpha} + E_i^{\text{ch}} \right) \mathbf{C}_i d\mathbf{C}_i = \\ &= \mathbf{h} + \sum_{i\alpha} \left(\frac{5}{2} kT_t + E_{i\alpha} + E_i^{\text{ch}} \right) n_{i\alpha} \mathbf{V}_{i\alpha}. \end{aligned} \quad (9.16\text{г})$$

Вектор плотности приведенного теплового потока

$$\mathbf{h} = -\lambda' \nabla T_t - p \sum_{i\alpha} D_{Ti\alpha} \mathbf{d}_{i\alpha} \equiv -\lambda' \nabla T_t - p \sum_{i\alpha} D_{Ti\alpha} (y_{i\alpha} \mathbf{d}_i + x_i \nabla y_{i\alpha}), \quad (9.16\text{д})$$

где

$$\lambda' = \frac{k}{3n} \sum_{i\alpha} \int f_{i\alpha}^{(0)} A_{i\alpha} C_i^2 \left(W_{ti}^2 - \frac{5}{2} \right) d\mathbf{C}_i.$$

Комментарии

1. Подробнее о выводе соотношения Стефана–Максвелла при использовании представления (9.15) см. [10, 17].

2. Выражение для \mathbf{h} дано в \mathbf{d} -представлении: именно в этом представлении получены формулы для векторных переносных свойств при помощи модифицированного метода Чепмена–Энскога (см. разд. 9.2). При этом \mathbf{V} -представление не применялось.

3. Коэффициенты переноса η , $D_{i\alpha j\beta}$, $D_{Ti\alpha}$, λ' и т. п. зависят от T_t , x_j , $y_{j\beta}$ и от интегральных сечений упругих и неупругих столкновений.

9.1.3. Правые части уравнений баланса заселенностей

Назначение модели

Уточнение методики разд. 8.3 и получение данных, необходимых для завершения вывода выражения для $G_{i\alpha}$ (см. формулу (9.5)).

Допущения

1. Химические реакции отсутствуют.

2. Применяется вариант обобщенного метода, определяемый условиями (9.9).

При подстановке выражения $f_{i\alpha} = f_{i\alpha}^{(0)} + f_{i\alpha}^{(1)}$ правая часть уравнения (8.1) баланса заселенностей принимает вид

$$K_{i\alpha} = K_{i\alpha}^{(0)} + K_{i\alpha}^{(1)}(\varphi), \quad (9.17)$$

где

$$K_{i\alpha}^{(0)} = \int J_{i\alpha}^0 d\mathbf{C}_i; \quad K_{i\alpha}^{(1)}(\varphi) = \int L_{i\alpha}(\varphi) d\mathbf{C}_i = \int L_{i\alpha}(\varphi_{i\alpha}^{(\text{III})}) d\mathbf{C}_i.$$

Комментарии

1. Величина $K_{i\alpha}^{(0)}$ рассчитывается в рамках нулевого приближения (т. е. при $f_{i\alpha} = f_{i\alpha}^{(0)}$).

2. Величина $K_{i\alpha}^{(1)}$ определяется только возмущением функции распределения $\varphi_{i\alpha}^{(\text{III})}$. В переносные свойства это возмущение вклада не дает.

Рассматривается модель, изложенная в п. 8.3.2. Вместо уравнения (8.26) имеет место следующее уравнение:

$$n_i^* \frac{dy_{i\alpha}^*}{dt^*} + O(\text{Kn}) = \frac{1}{\varepsilon} K_{i\alpha}^{(0)*} + \frac{\text{Kn}}{\varepsilon} K_{i\alpha}^{(1)*}.$$

При условии $\varepsilon = \text{Kn} \ll 1$ решение этой системы уравнений (как и в случае п. 8.3.2) представляется рядом по ε :

$$y_{i\alpha} = y_{i\alpha}^{(0)} + \varepsilon y_{i\alpha}^{(1)} + \dots$$

При этом

$$K_{i\alpha}^{(0)*} = K_{i\alpha}^{(00)*} + \varepsilon K_{i\alpha}^{(01)*} + \dots,$$

где первое слагаемое рассчитывается при $y_{i\alpha} = y_{i\alpha}^{(0)}$, второе получается путем линеаризации величины $K_{i\alpha}^{(0)}$ по ε относительно $y_{i\alpha}^{(0)}$ и является оператором, линейным по $y^{(1)}$.

Система уравнений в нулевом приближении

$$K_{i\alpha}^{(00)} = 0 \Rightarrow y_{i\alpha}^{(0)} = y_{i\alpha}^{\text{eq}}(T_t).$$

Ее решением являются локально равновесные (больцмановские) функции $y_{i\alpha}^{\text{eq}}(T_t)$.

Система уравнений в первом приближении

$$K_{i\alpha}^{(01)} = n_i \frac{dy_{i\alpha}^{\text{eq}}(T_t)}{dt} - K_{i\alpha}^{(1)}(\varphi_{i\alpha}^{(\text{III})})_{y=y^{\text{eq}}}.$$

Ее решения $y_{i\alpha}^{(1)}$ после перехода от T_t к T определяют объемную вязкость (см. разд. 8.3 и 8.4).

Комментарии

1. При условиях, близких к локально равновесным, слагаемые правой части формулы (9.17) равны по порядку величины, так как при этом

$$K_{i\alpha}^{(0)} \sim K_{i\alpha}^{(01)} \sim K_{i\alpha}^{(1)}(\varphi_{i\alpha}^{(\text{III})}).$$

2. При формулировке обобщенного метода Чепмена–Энскога необходимо учитывать этот факт (см. п. 9.1.4).

3. В методике разд. 8.3 и 8.4 величина $K_{i\alpha}^{(1)}(\varphi_{i\alpha}^{(\text{III})})$ не учитывается. Это приводит к ошибкам при вычислении объемной вязкости ς и релаксационного давления p_{rel} . Однако анализ значимости этих ошибок в настоящее время отсутствует. Для определения ς и p_{rel} применяется модифицированный метод Чепмена–Энскога (разд. 9.2).

4. Как и в разд. 8.3 и 8.4, выражения для вязкости, диффузионных скоростей и плотности теплового потока для конкретных ситуаций получаются из общих выражений п. 9.1.2 заменой заселенности $n_{i\alpha}$ на ее квазистационарное значение $\bar{n}_{i\alpha}$ и поступательной температуры T_t на температуру T , которая определяется по заселенности квантовых уровней, участвующих в быстрых процессах обмена энергий. При этом пренебрегается членами порядка $O(\text{Kn}^2)$ при вычислении величины $(f_{i\alpha}^{(0)} + f_{i\alpha}^{(1)})/f_{i\alpha}^{(0)}$. Кроме того, в формулах для соответствующих коэффициентов переноса пренебрегается вкладом операторов столкновений для медленных процессов (см. разд. 9.2).

9.1.4. Исключение полных производных от газодинамических переменных

Назначение

Исключение полных производных от газодинамических переменных; вычисление величины $G_{i\alpha}$ (см. выражение (9.5)) и окончательная формулировка уравнения (9.4). Рассматриваются следующие методы.

1. В классическом (гл. 4) и модифицированном (разд. 9.2) методе Чепмена–Энскога производные d_0/dt от газодинамических переменных вычисляются с применением уравнений баланса, в которых все слагаемые определяются при помощи функций распределения в нулевом приближении $f^{(0)}$. При этом переносные свойства равны нулю (приближение Эйлера).

2. В обобщенном методе для этого применяются уравнения (9.1)–(9.3), переносные свойства π , $\mathbf{V}_{i\alpha}$, \mathbf{q} также полагаются равными нулю.

3. В варианте метода, в котором используются условия (9.9), член $d_0 n_{i\alpha}/dt$ вычисляется по формуле

$$\frac{d_0 n_{i\alpha}}{dt} = -n_{i\alpha} \nabla \cdot \mathbf{v} + K_{i\alpha}^{(0)} + K_{i\alpha}^{(1)}(\varphi) \quad (9.18)$$

с учетом значения $K_{i\alpha}^{(1)}(\varphi)$, определяемого не в нулевом, а в первом приближении метода. Этот учет обусловлен тем, что в условиях близких к локально равновесным (см. разд. 9.1.3), последние два члена этой формулы равны по порядку величины. При использовании формулы (9.18) выражение (9.5) для $G_{i\alpha}$ принимает вид

$$G_{i\alpha} = \frac{1}{n_{i\alpha}} [K_{i\alpha}^{(0)} + K_{i\alpha}^{(1)}(\varphi)] + \frac{1}{nkT_t} \left(1 - \frac{2}{3} W_{ti}^2\right) \sum_{j\beta} E_{j\beta} [K_{j\beta}^{(0)} + K_{j\beta}^{(1)}(\varphi)] - \frac{J_{i\alpha}^0}{f_{i\alpha}^{(0)}}. \quad (9.19)$$

Эта величина и, следовательно, правая часть уравнения (9.4) зависят от искомой функции φ (а не только левая часть $L_{i\alpha}(\varphi)$). Математическая теория получающейся системы интегральных уравнений разработана в [3, 4].

4. В варианте метода, в котором используются условия (9.10), разложение (9.11) заселенности $n_{i\alpha}$ в ряд по числу Кнудсена строится так, чтобы выполнялось равенство [2, 9]

$$K_{i\alpha}^{(0)} + K_{i\alpha}^{(1)}(\varphi) = \tilde{K}_{i\alpha}^{(0)}, \quad \tilde{K}_{i\alpha}^{(0)} = \int \tilde{J}_{i\alpha}^0 d\mathbf{C}_i.$$

Волна сверху означает, что данная величина рассчитывается при $n_{i\alpha} = n_{i\alpha}^{(0)}$. В выражениях (9.4), (9.5) производится замена $n_{i\alpha}$ на $n_{i\alpha}^{(0)}$, вместо (9.18) используется формула

$$\frac{d_0 n_{i\alpha}^{(0)}}{dt} = -n_{i\alpha}^{(0)} \nabla \cdot \mathbf{v} + \tilde{K}_{i\alpha}^{(0)},$$

так что теперь вместо выражения (9.19) имеет место выражение

$$G_{i\alpha} = \frac{1}{n_{i\alpha}^{(0)}} \tilde{K}_{i\alpha}^{(0)} + \frac{1}{nkT_t} \left(1 - \frac{2}{3} W_{ti}^2\right) \sum_{j\beta} E_{j\beta} \tilde{K}_{j\beta}^{(0)} - \frac{\tilde{J}_{i\alpha}^0}{\tilde{f}_{i\alpha}^{(0)}}.$$

В этом варианте правая часть уравнения (9.4) не зависит от искомой функции $\varphi_{i\alpha}$, оно имеет традиционный для метода Чепмена–Энскога вид (см. [2–6, 9]).

Комментарии

1. Величина $\varphi_{i\alpha}^{(\text{III})}$ не зависит от градиентов газодинамических переменных.

2. В гиперзвуковой газодинамике (см. гл. 8 и [5, 13]) объемная вязкость и релаксационное давление обычно не учитываются, используются полуэмпирические выражения для правых частей (источниковых членов) уравнений баланса заселенностей и плотностей химических компонентов, величинами $K_{i\alpha}^{(1)}(\varphi_{i\alpha}^{(\text{III})})$ фактически пренебрегается. Если последние опустить в формуле (9.19) для $G_{i\alpha}$, то система уравнений

(9.4) будет системой интегральных уравнений с самосопряженным интегральным оператором, как и в разд. 4.2 и 4.3.

9.1.5. Приближенная теория переносных свойств

Д о п у щ е н и я

1. Внутренние степени свободы частиц делятся на два вида, которые характеризуются наборами квантовых чисел α_I и α_{II} , так что характеризующий квантовое состояние частиц компонента i индекс $\alpha = \alpha_I \alpha_{II}$.

2. Линеаризованные операторы неупругих столкновений, при которых происходит обмен энергией $E_{i\alpha_I}$ — основного порядка величины, т.е. они учитываются в левых частях уравнений (9.12). Дифференциальные сечения столкновений в этих операторах не зависят от α_{II} — квантовых чисел состояний молекул, по которым проведено осреднение:

$$\sigma_{i\alpha_I \alpha_{II} j \beta_I \beta_{II}}^{i\gamma_I \alpha_{II} j \delta_I \beta_{II}} = \sigma_{i\alpha_I j \beta_I}^{i\gamma_I j \delta_I}.$$

3. Энергия частицы компонента i в квантовом состоянии с числами α_I не зависит от квантовых чисел α_{II} и равна $E_{i\alpha_I}$.

4. Линеаризованные операторы столкновений, обусловленные состояниями с квантовыми числами α_{II} и химическими реакциями, малы и ими пренебрегают в левых частях систем уравнений (9.12).

П р и м е р ы

1. Состояния с квантовыми числами α_I отсутствуют, $\alpha_{II} = \alpha_R \alpha_V \alpha_{эл}$ (рассмотрено в разд. 10.1 и 10.2);

2. $\alpha_I = \alpha_R$, $\alpha_{II} = \alpha_V \alpha_{эл}$ (рассмотрено в разд. 10.3 при дополнительном допущении о близости распределения по вращательной энергии к больцмановскому).

3. $\alpha_I = \alpha_R \alpha_V$, $\alpha_{II} = \alpha_{эл}$.

Здесь наборы квантовых чисел α_R , α_V , $\alpha_{эл}$ характеризуют вращательное, колебательное и электронное состояния частиц сорта $i\alpha$.

О б о з н а ч е н и я

$E_{i\alpha_I}$, $E_{i\alpha_{II}}$ — энергия частиц компонента i в состояниях с набором квантовых чисел α_I , α_{II} соответственно

$f_{i\alpha_I}^{(0)}$ — максвелловская функция распределения по скоростям частиц компонента i в состоянии с набором квантовых чисел α_I

$Y_{i\alpha_I \alpha_{II}}$ — отношение заселенности $n_{i\alpha}$ состояния с набором квантовых чисел $\alpha = \alpha_I \alpha_{II}$ частиц компонента i к заселенности $n_{i\alpha_I}$

$n_{i\alpha_I}$ — заселенность состояния с набором квантовых чисел α_I частиц компонента i

$\varphi_{i\alpha_I}^{(I)}$ — тензорная часть возмущения функции распределения, даваемая формулой (9.13) при замене $n_{i\alpha}$ на $n_{i\alpha_I}$

$\varphi_{i\alpha_I}^{(II)}$ — векторная часть возмущения, даваемая формулами (9.14) или (9.15б) при замене $n_{i\alpha}$ на $n_{i\alpha_I}$

Определения

Функция распределения частиц сорта $i\alpha$ в нулевом приближении

$$f_{i\alpha}^{(0)} = Y_{i\alpha_1\alpha_{II}} f_{i\alpha_1}^{(0)}, \quad f_{i\alpha_1}^{(0)} = n_{i\alpha_1} \left(\frac{m_i}{2\pi k T_t} \right)^{3/2} \exp(-W_{it}^2). \quad (9.20)$$

Соотношения между заселенностями частиц сорта $i\alpha_I$, $i\alpha_{II}$ и $i\alpha$

$$Y_{i\alpha_1\alpha_{II}} = \frac{n_{i\alpha}}{n_{i\alpha_1}}; \quad \sum_{\alpha_{II}} Y_{i\alpha_1\alpha_{II}} = 1; \quad n_{i\alpha_1} = \sum_{\alpha_I} n_{i\alpha}; \quad \alpha = \alpha_I \alpha_{II}. \quad (9.21)$$

Решения систем уравнений (9.12) для возмущений $\varphi_{i\alpha}^{(I)}$ и $\varphi_{i\alpha}^{(II)}$ [2]

$$\varphi_{i\alpha}^{(I)} = \varphi_{i\alpha_1}^{(I)}, \quad \varphi_{i\alpha}^{(II)} = \varphi_{i\alpha_1}^{(II)} - Q_{i\alpha_1} \mathbf{C}_i \cdot \nabla \ln Y_{i\alpha_1\alpha_{II}}. \quad (9.22)$$

Система уравнений для функций $Q_{i\alpha_1}$

$$\sum_{\kappa} \int \frac{\Gamma}{2} (Q'_{i\gamma_1} \mathbf{C}'_i - Q_{i\alpha_1} \mathbf{C}_i) g_{ij} \sigma_{i\alpha_1 j \beta_1}^{i\gamma_1 j \delta_1} d\Omega d\mathbf{C}_j = -f_{i\alpha_1}^{(0)} \mathbf{C}_i, \quad (9.23)$$

$$\kappa = j\beta_1 \gamma_1 \delta_1, \quad \Gamma = \frac{S_{i\alpha_1} S_{j\beta_1}}{S_{i\gamma_1} S_{j\delta_1}} f_{i\gamma_1}^{(0)'} f_{j\delta_1}^{(0)'} + f_{i\alpha_1}^{(0)} f_{j\beta_1}^{(0)}. \quad (9.24)$$

Комментарии

1. Функции $\varphi_{i\alpha_1}^{(I)}$, $\varphi_{i\alpha_1}^{(II)}$, $Q_{i\alpha_1}$ не зависят от индекса α_{II} , от сечений столкновений для α_{II} -процессов и химических реакций.

2. Левая часть уравнения (9.23) включает и соответствующий оператор упругих столкновений.

Переносные свойства и коэффициенты переноса

Коэффициент вязкости

$$\eta = \frac{1}{15n} \sum_{i\alpha_1} m_i \int f_{i\alpha_1}^{(0)} B_{i\alpha_1} C_i^4 d\mathbf{C}_i. \quad (9.25)$$

Вектор диффузионной скорости частиц сорта $i\alpha_1$

$$\begin{aligned} \mathbf{V}_{i\alpha_1} &= \sum_{\alpha_{II}} Y_{i\alpha_1\alpha_{II}} \mathbf{V}_{i\alpha_1\alpha_{II}} = \frac{1}{n_{i\alpha_1}} \int f_{i\alpha_1}^{(0)} \varphi_{i\alpha_1}^{(II)} \mathbf{C}_i d\mathbf{C}_i = \\ &= - \sum_{j\beta_1} D_{i\alpha_1 j \beta_1} \mathbf{d}_{j\beta_1} - D_{Ti\alpha_1} \nabla \ln T_t. \end{aligned} \quad (9.26)$$

Коэффициент диффузии

$$D_{i\alpha_1 j \beta_1} = \frac{1}{3n n_{i\alpha_1}} \int f_{i\alpha_1}^{(0)} D_{i\alpha_1}^{j\beta_1} C_i^2 d\mathbf{C}_i. \quad (9.27)$$

Коэффициент термодиффузии частиц сорта $i\alpha_I$ в квантовом состоянии α_I

$$D_{Ti\alpha_I} = \frac{1}{3nn_{i\alpha_I}} \int f_{i\alpha_I}^{(0)} A_{i\alpha_I} C_i^2 d\mathbf{C}_i. \quad (9.28)$$

Вектор диффузионной скорости компонента i

$$\mathbf{V}_i = \frac{1}{n_i} \sum_{\alpha_I} n_{i\alpha_I} \mathbf{V}_{i\alpha_I}. \quad (9.29)$$

Вектор плотности теплового потока, обусловленного переносом кинетической энергии частиц

$$\mathbf{q}_t = \sum_{i\alpha_I} \int f_{i\alpha_I}^{(0)} \varphi_{i\alpha_I}^{(\Pi)} \frac{m_i}{2} C_i^2 \mathbf{C}_i d\mathbf{C}_i. \quad (9.30)$$

Вектор плотности теплового потока, обусловленного переносом внутренней энергии $E_{i\alpha_I}$ частиц

$$\mathbf{q}_V^{(1)} = \sum_{i\alpha_I} E_{i\alpha_I} n_{i\alpha_I} \mathbf{V}_{i\alpha_I}. \quad (9.31)$$

Вектор диффузионной скорости частиц компонента i в квантовом состоянии $\alpha = \alpha_I \alpha_{II}$

$$\mathbf{V}_{i\alpha_I \alpha_{II}} = \mathbf{V}_{i\alpha_I} - \frac{1}{n_{i\alpha_I \alpha_{II}}} \sigma_{i\alpha_I} \nabla Y_{i\alpha_I \alpha_{II}}, \quad (9.32)$$

$$\sigma_{i\alpha_I} = \frac{1}{3} \int f_{i\alpha_I}^{(0)} C_i^2 Q_{i\alpha_I} d\mathbf{C}_i.$$

Вектор плотности полного теплового потока

$$\mathbf{q} = \mathbf{q}_t + \mathbf{q}_V^{(1)} + \sum_{i\alpha_I \alpha_{II}} n_{i\alpha_I \alpha_{II}} E_{i\alpha_{II}} \mathbf{V}_{i\alpha_I} - \sum_{i\alpha_I \alpha_{II}} \sigma_{i\alpha_I} \nabla (E_{i\alpha_{II}} Y_{i\alpha_I \alpha_{II}}) + \sum_i n_i E_i^{\text{ch}} \mathbf{V}_i. \quad (9.33)$$

Комментарии

1. Возмущениями $\varphi_{i\alpha_I}^{(\text{I})}$, $\varphi_{i\alpha_I}^{(\text{II})}$ (с учетом выражений, приведенных в п. 9.1.2) определяются переносные свойства и коэффициенты переноса (9.25)–(9.33).

2. Термодинамическая диффузионная сила $\mathbf{d}_{j\beta_I}$ получается из выражения для $\mathbf{d}_{j\beta}$ заменой $j\beta$ на $j\beta_I$.

3. Процессы и химические реакции, в которых участвуют частицы компонента i в состояниях с набором квантовых чисел $i\alpha_{II}$, влияют на переносные свойства (9.32), (9.33).

9.2. Модифицированный метод Чепмена–Энскога и его применения

9.2.1. Модифицированный метод Чепмена–Энскога

Назначение

Вычисление выражений для переносных свойств и скоростей физико-химических процессов, замыкающих уравнения релаксационной газодинамики, применительно к средам, состояние которых сильно отличается от локально равновесного.

Допущения

1. Соотношения между временами релаксации быстрых и медленных процессов не меняются в рассматриваемой области течения газа.
2. Химические реакции являются медленными процессами.

Комментарии

1. Отличие от классического метода Чепмена–Энскога: оператор столкновений содержит большие и малые части, соответственно для быстрых и медленных релаксационных процессов возбуждения внутренних степеней свободы и химических реакций (см. введение, [2]).

2. Быстрыми называются процессы, характерные времена которых τ_{rap} значительно меньше газодинамического времени t_* , медленными — процессы с характерным временем τ_{sl} , сравнимым с t_* . Таким образом, часть неравновесных процессов протекает в газодинамическом масштабе: $\tau_{\text{rap}} \ll \tau_{\text{sl}} \sim t_*$.

3. Обобщенный метод Чепмена–Энскога описывает ситуации, когда все неравновесные процессы могут протекать как в газодинамическом масштабе, так и в масштабе $\tau \ll t_*$.

4. Приложения модифицированного метода Чепмена–Энскога разработаны в [18–21].

Системы кинетических уравнений в безразмерном виде

$$D_{i\alpha}^*(f_{i\alpha}^*) = \frac{1}{\text{Kn}} J_{i\alpha}^{\text{rap}} + J_{i\alpha}^{\text{sl}}. \quad (9.34)$$

Обозначения

$J_{i\alpha}^{\text{rap}}$ — оператор столкновений для быстрых процессов

$J_{i\alpha}^{\text{sl}}$ — оператор столкновений для медленных процессов

$J_{i\alpha}^{\text{sl}(0)}$ — оператор столкновений для медленных процессов, рассчитанный при $f = f^{(0)}$

Kn — число Кнудсена, равное отношению характерного времени релаксации быстрых процессов τ_{rap} к характерному газодинамическому времени t_*

α_I — набор квантовых чисел для состояний, участвующих в процессах быстрого обмена

α_{Π} — набор квантовых чисел, характеризующих состояния, участвующие в медленных процессах

α_R — набор квантовых чисел, характеризующих вращательную энергию

α_V — набор квантовых чисел, характеризующих колебательную энергию

$\bar{n}_{i\alpha}$ — квазистационарное значение заселенности частиц сорта $i\alpha$

$\bar{y}_{i\alpha}$ — квазистационарное распределение относительных заселенностей по внутренней энергии молекул, равное отношению $\bar{n}_{i\alpha}$ к числовой плотности n_i частиц компонента i

σ, T — параметры этого распределения.

Комментарии

1. Оператор J^{rap} содержит оператор упругих столкновений и, как правило, оператор вращательных обменов. По мере роста температуры увеличиваются относительные вклады операторов остальных неупругих столкновений, в зависимости от типа компонента газа и квантовых чисел энергетического уровня.

2. Оператор J^{sl} содержит операторы столкновений, вызывающих химические реакции, а также оператор столкновений для медленных обменов (как правило, колебательных и электронных).

9.2.2. Переносные свойства, вычисленные с функцией распределения в нулевом и первом приближениях

Система уравнений в нулевом приближении

$$J_{i\alpha}^{\text{rap}} = 0. \quad (9.35)$$

Функции распределения в нулевом приближении

$$f_{i\alpha}^{(0)} = n_i y_{i\alpha} \left(\frac{m_i}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp(-W_i^2); \quad (9.36)$$

$$W_i^2 = \frac{m_i C_i^2}{2kT}; \quad \alpha = \alpha_I \alpha_{\Pi}.$$

Комментарии

1. Функция распределения $f_{i\alpha}^{(0)}$ — локально равновесная (максвелловская) по скоростям и в приближении Эйлера $\mathbf{V}_{i\alpha}^{(0)} = 0$, $\boldsymbol{\pi}^{(0)} = 0$, $P^{(0)} = p = nkT$, $\mathbf{q}^{(0)} = 0$.

2. Относительная заселенность $y_{i\alpha}$ является квазистационарным распределением по внутренней энергии молекул и зависит от T и других газодинамических переменных σ :

$$y_{i\alpha} = \bar{y}_{i\alpha}(T, \sigma). \quad (9.37)$$

3. Температура T определяется той частью внутренней энергии \mathcal{E} , которая обусловлена быстрыми обменами энергией молекул. Примеры даны в п. 9.2.3 и 9.2.4.

4. Условия единственности определяются набором аддитивных инвариантов столкновений молекул для быстрых процессов.

Функции распределения в первом приближении

$$f_{i\alpha} = f_{i\alpha}^{(0)} + f_{i\alpha}^{(1)}. \quad (9.38)$$

Представление поправки $f_{i\alpha}^{(1)}$ через возмущение $\varphi_{i\alpha}$

$$f_{i\alpha}^{(1)} = f_{i\alpha}^{(0)} \varphi_{i\alpha}; \quad \varphi_{i\alpha} = \varphi_{i\alpha}^{(\text{I})} + \varphi_{i\alpha}^{(\text{II})} + \varphi_{i\alpha}^{(\text{III})}. \quad (9.39)$$

Комментарий

Используются обозначения разд. 9.1: $\varphi_{i\alpha}^{(\text{I})}$, $\varphi_{i\alpha}^{(\text{II})}$, $\varphi_{i\alpha}^{(\text{III})}$ — тензорная, векторная, скалярная (по собственной скорости частицы \mathbf{C}_i) части возмущения $\varphi_{i\alpha}$ соответственно.

Система уравнений для возмущения $\varphi_{i\alpha}$

$$L_{i\alpha}^{\text{rap}}(\varphi) = D_{i\alpha} f_{i\alpha}^{(0)} - J_{i\alpha}^{\text{sl}(0)}. \quad (9.40)$$

Комментарий

Отличия системы (9.40) от системы уравнений (9.4).

1. Самосопряженный оператор $L_{i\alpha}^{\text{rap}}(\varphi)$ — следствие линеаризации оператора столкновений $J_{i\alpha}^{\text{rap}}$ для быстрых процессов

$$L_{i\alpha}^{\text{rap}}(\varphi_{i\alpha}) \equiv \sum_{\kappa} \int f_{i\alpha_1\alpha_2}^{(0)} f_{i\beta_1\beta_2}^{(0)} (\varphi'_{i\gamma_1\alpha_2} + \varphi'_{i\delta_1\beta_2} - \varphi_{i\alpha_1\alpha_2} - \varphi_{j\beta_1\beta_2}) g_{ij} \sigma_{i\alpha_1\alpha_2j\beta_1\beta_2}^{i\gamma_1\alpha_2j\delta_1\beta_2} d\Omega d\mathbf{C}_j; \quad \kappa = j\beta_1\beta_2\gamma_1\delta_1. \quad (9.41)$$

Этот оператор определяет набор аддитивных инвариантов столкновений и, следовательно, набор газодинамических переменных, для которых замыкается система уравнений газодинамики. Он включает операторы упругих и неупругих столкновений.

2. Оператор $J_{i\alpha}^{\text{sl}(0)}$ — оператор столкновений для медленных процессов, рассчитанный в нулевом приближении (по $f = f^{(0)}$).

3. Производные d_0/dt от газодинамических переменных, входящие в оператор $D_{i\alpha} f_{i\alpha}^{(0)}$, вычисляются при помощи уравнений баланса в приближении Эйлера, т. е. при условии $f_{i\alpha} = f_{i\alpha}^{(0)}$.

Системы уравнений для определения возмущений $\varphi_{i\alpha}^{(I)}$, $\varphi_{i\alpha}^{(II)}$

$$\begin{aligned} L_{i\alpha}^{\text{rap}}(\varphi_{i\alpha}^{(I)}) &= f_{i\alpha}^{(0)} \frac{m_i}{kT} \left(\mathbf{C}_i \mathbf{C}_i - \frac{1}{3} \delta C_i^2 \right) : \nabla \mathbf{v}, \\ L_{i\alpha}^{\text{rap}}(\varphi_{i\alpha}^{(II)}) &= f_{i\alpha}^{(0)} \left\{ \mathbf{C}_i \cdot \left(\frac{n}{n_i} \mathbf{d}_i + \nabla \ln \bar{y}_{i\alpha} \right) + \left(W_i^2 - \frac{5}{2} \right) \mathbf{C}_i \cdot \nabla \ln T \right\}. \end{aligned} \quad (9.42)$$

Комментарий

1. Правые части этих уравнений следуют из правых частей уравнений (9.12) при следующих заменах:

$$T_t \rightarrow T, \quad W_{ti}^2 \rightarrow W_i^2, \quad y_{i\alpha} \rightarrow \bar{y}_{i\alpha}(T, \sigma). \quad (9.43)$$

2. Бездивергентный тензор напряжений во всех частных случаях дается выражением

$$\boldsymbol{\pi} = -2\eta \mathbf{S}.$$

Векторные переносные свойства

Выражения для векторных переносных свойств получаются из формул (9.16б)–(9.16д) п. 9.1.2 путем замен (9.43), подстановки конкретных выражений для $\bar{y}_{i\alpha}$ (при этом величина $\nabla \ln y_{i\alpha}$ будет линейной функцией градиентов ∇T и $\nabla \sigma$) и дальнейших необходимых преобразований (см. п. 9.2.2. и 9.2.3).

Коэффициенты переноса

Выражения для коэффициентов переноса, входящих в формулы для тензорного и векторных переносных свойств, могут быть получены из выражений, даваемых обобщенным методом Чепмена–Энскога (п. 9.1.2), если в них опустить линеаризованные операторы неупругих столкновений для медленных процессов и произвести замены (9.43). В настоящее время они получаются модифицированным методом Чепмена–Энскога для конкретных случаев.

Решение системы уравнений для возмущений $\varphi_{i\alpha}^{(III)}$

$$\varphi_{i\alpha}^{(III)} = -\frac{1}{n} M_{i\alpha} \nabla \cdot \mathbf{v} - \frac{1}{n} N_{i\alpha}. \quad (9.44)$$

Полный тензор напряжений

$$\boldsymbol{\Pi} = (p - \varsigma \nabla \cdot \mathbf{v} - p_{\text{rel}}) \delta - 2\eta \mathbf{S}; \quad p = nkT. \quad (9.45)$$

Коэффициент объемной вязкости

$$\varsigma = \frac{1}{3n} \sum_{i\alpha} m_i \int M_{i\alpha} C_i^2 f_{i\alpha}^{(0)} d\mathbf{C}_i; \quad \alpha = \alpha_I \alpha_{II}. \quad (9.46)$$

Релаксационное давление

$$p_{\text{rel}} = \frac{1}{3n} \sum_{i\alpha} m_i \int N_{i\alpha} C_i^2 f_{i\alpha}^{(0)} d\mathbf{C}_i; \quad \alpha = \alpha_I \alpha_{II}. \quad (9.47)$$

Комментарии

1. При выводе системы уравнений для возмущений $\varphi_{i\alpha}^{(\text{III})}$ в правой части уравнения (9.4) и в выражении (9.5) производятся замены (9.43), операторы d_0/dt от газодинамических переменных n_i , σ , T исключаются с помощью уравнений баланса для n_i , σ и уравнения энергии. В уравнениях для σ не учитываются слагаемые, аналогичные слагаемому $K_{i\alpha}^{(1)}$ в выражении (9.17). Величина $J_{i\alpha}^0$ заменяется на $J_{i\alpha}^{\text{sl}(0)}$. В итоге правая часть этой системы уравнений является суммой $\Phi_{i\alpha}(W^2) + \Psi_{i\alpha}(W^2)\nabla \cdot \mathbf{v}$, где функции Φ , Ψ не зависят от градиентов газодинамических переменных.

2. В отличие от формулы (9.16а) след полного тензора напряжений (9.45) содержит объемную вязкость $\zeta \nabla \cdot \mathbf{v}$ и релаксационное давление p_{rel} .

3. Релаксационное давление отлично от нуля при наличии быстрых и медленных неупругих процессов одновременно.

4. В отличие от остальных коэффициентов переноса релаксационное давление p_{rel} зависит и от сечений столкновений для медленных процессов (в уравнение для его определения входит оператор $J_{i\alpha}^{\text{sl}(0)}$).

5. При определении температуры по поступательным степеням свободы полный тензор напряжений дается формулой (9.16а), но в выражении для внутренней энергии смеси газов входят слагаемые, аналогичные объемной вязкости и релаксационному давлению (см. разд. 8.3, 8.4).

9.2.3. Переносные свойства сред с колебательно-химической релаксацией

Допущения

1. Обмены колебательной энергией молекул и химические реакции относятся к медленным процессам, их характерные времена порядка характерного газодинамического времени t_* .

2. Вращательные обмены относятся к быстрым процессам.

3. Электронные степени свободы молекул заморожены.

4. В результате принятых допущений справедливы равенства

$$\alpha_I = \alpha_R, \quad \alpha_{II} = \alpha_V, \quad \text{т. е.} \quad \alpha = \alpha_R \alpha_V.$$

Комментарий

1. В оператор столкновений $J_{i\alpha}^{\text{rap}}$ входят интегралы столкновений с TT-, RT- и RR-обменами, в оператор $J_{i\alpha}^{\text{sl}}$ — с VV- и VT-обменами, а также с обменом энергией при химических реакциях.

Функция распределения в нулевом приближении

Функция распределения в нулевом приближении дается формулами (9.36), (9.37), где квазистационарное распределение для относительных заселенностей записывается в виде

$$y_{i\alpha} = \bar{y}_{i\alpha} = y_{i\alpha_R}^B(T) y_{i\alpha_V}. \quad (9.48)$$

Комментарий

Распределение $y_{i\alpha}$ равновесно по безразмерной вращательной энергии $\varepsilon_{i\alpha_R}^{(V)}$ и зависит от температуры T и относительных заселенностей $y_{i\alpha_V}$, поэтому здесь параметр $\sigma = y_{i\alpha_V}$. В общем случае вращательная энергия и вращательные статистические суммы зависят от колебательных уровней α_V , что отмечено верхним индексом V .

Обозначения

$Q_i^{R(V)}(T)$ — статистическая сумма по вращательным состояниям молекул

$S_{i\alpha_R}^{(V)}$ — статистический вес вращательных состояний

$n_{i\alpha_V}$ — заселенность состояния молекул компонента i с набором квантовых чисел α_V

$y_{i\alpha_V}$ — относительная заселенность состояния молекул сорта $i\alpha_V$

$y_{i\alpha_R}^B(T)$ — больцмановское распределение по вращательной энергии молекул сорта $i\alpha_R$

T — поступательно-вращательная температура

$\varepsilon_{i\alpha_R}^{(V)}$ — безразмерная вращательная энергия.

Определения

Статистическая сумма по вращательным состояниям молекул

$$Q_i^{R(V)}(T) = \sum_{\alpha_R} S_{i\alpha_R}^{(V)} \exp(-\varepsilon_{i\alpha_R}^{(V)}), \quad (9.48a)$$

Заселенность состояния молекул компонента i с набором квантовых чисел α_V

$$n_{i\alpha_V} = \sum_{\alpha_R} n_{i\alpha_R\alpha_V}. \quad (9.48б)$$

Относительная заселенность состояния молекул сорта $i\alpha$

$$y_{i\alpha_V} = \frac{n_{i\alpha_V}}{n_i}, \quad (9.48в)$$

Больцмановское распределение по вращательной энергии молекул сорта $i\alpha$

$$y_{i\alpha_R}^B(T) = \frac{S_{i\alpha_R}^{(V)}}{Q_i^{R(V)}(T)} \exp(-\varepsilon_{i\alpha_R}^{(V)}), \quad (9.48г)$$

Безразмерная вращательная энергия

$$\varepsilon_{i\alpha R}^{(V)} = \frac{E_{i\alpha R}^{(V)}}{kT}, \quad (9.48д)$$

Газодинамические переменные: $n_{i\alpha V}$, \mathbf{v} , T .

Газодинамические переменные определяются по функциям распределения в нулевом приближении $f^{(0)}$:

$$\begin{aligned} n_{i\alpha V} &= \sum_{\alpha R} \int f_{i\alpha}^{(0)} d\mathbf{c}_i; \quad \mathbf{v} = \frac{1}{\rho} \sum_{i\alpha} m_i \int \mathbf{c}_i f_{i\alpha}^{(0)} d\mathbf{c}_i, \\ \frac{3}{2} kT + \varepsilon_R(T) &= \sum_{i\alpha} \int \left(\frac{m_i C_i^2}{2} + E_{i\alpha R}^{(V)} \right) f_{i\alpha}^{(0)} d\mathbf{c}_i; \quad \alpha = \alpha_R \alpha_V. \end{aligned} \quad (9.49)$$

Последнее равенство является определением поступательно-вращательной температуры T . На следующие члены разложения функции распределения $f_{i\alpha}^{(\xi)}$, $\xi \geq 1$, накладываются условия, аналогичные условиям (4.5).

Система уравнений газодинамики

Система уравнений газодинамики приведена в п. 8.3.4. Правая часть уравнения (8.36) для относительных колебательных заселенностей $y_{i\alpha V}$ [21–24] дается формулами

$$\begin{aligned} K_{i\alpha V} &= K_{i\alpha V}^{(0)} + K_{i\alpha V}^{(1)}; \quad K_{i\alpha V}^{(0)} = \sum_{\alpha R} \int J_{i\alpha}^{\text{sl}(0)} d\mathbf{c}_i, \\ K_{i\alpha V}^{(1)} &= -\frac{1}{n} \sum_{\alpha R} \left(\int L_{i\alpha}^{\text{sl}}(\varphi) d\mathbf{c}_i \right) \nabla \cdot \mathbf{v} - \frac{1}{n} \sum_{\alpha R} \int L_{i\alpha}^{\text{sl}}(\varphi) d\mathbf{c}_i, \end{aligned} \quad (9.50)$$

где $L_{i\alpha}^{\text{sl}}(\varphi)$ и $L_{i\alpha}^{\text{sl}}(\varphi)$ — линеаризованные операторы столкновений для медленных процессов.

Комментарии

1. Использовано решение (9.44) для возмущения $\varphi_{i\alpha}^{(\text{III})}$.
2. При сформулированных условиях ($\tau_{\text{sl}} \sim t_*$) отношение $\frac{K_{i\alpha V}^{(1)}}{K_{i\alpha V}^{(0)}} = O(\text{Kn}) \ll 1$ и в приближении Эйлера величиной $K_{i\alpha V}^{(1)}$ пренебрегается.

Векторные переносные свойства

Согласно правилам перехода к частным случаям, изложенным после формул (9.11), в выражениях п. 9.1.2 производятся замены (9.43). В данном случае справедлива формула

$$\nabla \ln \bar{y}_{i\alpha} = \frac{d \ln y_{i\alpha R}^B}{dT} \nabla T + \nabla \ln y_{i\alpha V}, \quad \alpha = \alpha_R \alpha_V. \quad (9.51)$$

Вектор диффузионной скорости частиц компонента i в колебательном состоянии α_V

$$\mathbf{V}_{i\alpha_V} = \frac{1}{n_{i\alpha_V}} \sum_{\alpha_R} n_{i\alpha} \mathbf{V}_{i\alpha} = - \sum_{j\beta_V} D_{i\alpha_V j\beta_V} \mathbf{d}_{j\beta_V} - D_{Ti\alpha_V} \nabla \ln T, \quad (9.52)$$

$$\mathbf{d}_{j\beta_V} = y_{j\beta_V} \mathbf{d}_j + x_j \nabla y_{j\beta_V}.$$

Комментарий

Использованы формулы (9.16б), (9.50); с их учетом определены новые коэффициенты переноса $D_{i\alpha_V j\beta_V}$, $D_{Ti\alpha_V}$.

Вектор плотности полного теплового потока

$$\mathbf{q} = \mathbf{h} + \sum_i n_i \left[\left(\frac{5}{2} kT + E_i^R + E_i^{\text{ch}} \right) \mathbf{V}_i + \sum_{\alpha_V} y_{i\alpha_V} E_{i\alpha_V} \mathbf{V}_{i\alpha_V} \right]. \quad (9.53)$$

Вектор плотности приведенного теплового потока

$$\mathbf{h} = -\lambda' \nabla T - p \sum_{i\alpha_V} D_{Ti\alpha_V} \mathbf{d}_{i\alpha_V}, \quad (9.54)$$

где $E_i^R = \sum_{\alpha_R} y_{i\alpha_R}^B(T) E_{i\alpha_R}$.

Комментарий

1. Использованы формулы (9.16в)–(9.16д), (9.51), (9.52); предположено, что вращательная энергия молекулы не зависит от колебательного состояния и равна $E_{i\alpha_R}$.

2. Теория переносных свойств дана в работах [21–23, 25, 26]. Представлены результаты решения интегральных уравнений рядами по полиномам Сонина и Вальдмана–Трубенбахера. Проведен сравнительный анализ значений коэффициентов переноса при различных упрощающих предположениях. Выражения для переносных свойств и коэффициентов переноса упрощаются, если энергия вращения молекул и сечения вращательного энергообмена не зависят от колебательного состояния молекул (разд. 10.3).

9.2.4. Переносные свойства многотемпературной смеси. Быстрые обмены колебательными квантами молекул-ангармонических осцилляторов

Допущения

1. В смеси колебательно возбужденных газов интенсивность обмена колебательными квантами при столкновении одинаковых молекул много больше интенсивности перехода колебательной энергии в другие виды энергии, в частности обмена колебательными квантами между молекулами разного химического состава. Условия применимости допущения см. введение, [2].

2. Новым аддитивным инвариантом столкновений является число колебательных квантов в каждой моде колебаний, сохраняющихся при столкновениях.

3. Оператор $J_{i\alpha}^{\text{rap}}$ складывается из операторов упругих столкновений, столкновений с переходами вращательной энергии и оператора VV₁-обменов колебательными квантами одного типа

$$J_{i\alpha}^{\text{rap}} = J_{i\alpha}^{\text{el}} + J_{i\alpha}^R + J_{i\alpha}^{\text{VV}_1}; \quad \alpha = \alpha_R \alpha_V.$$

4. Медленный процесс определяется VV₂-обменами колебательными квантами разных сортов, TRV-переходами и химическими реакциями $J_{i\alpha}^{\text{sl}} = J_{i\alpha}^{\text{VV}_2} + J_{i\alpha}^{\text{TRV}} + J_{i\alpha}^{\text{ch}}$.

5. Энергия вращения не зависит от колебательного состояния молекул: $E_{i\alpha_R}^{(V)} = E_{i\alpha_R}$.

Система уравнений баланса в нулевом приближении

$$J_{i\alpha}^{\text{el}} + J_{i\alpha}^R = 0; \quad J_{i\alpha}^{\text{VV}_1} = 0.$$

Решение этой системы уравнений представляется формулами (9.36), (9.48), где относительная заселенность колебательных уровней записывается в виде

$$\begin{aligned} y_{i\alpha_V} &= \bar{y}_{i\alpha_V} \equiv \frac{S_{i\alpha_V}}{Q_i^V(T, T_{1i})} \exp(-\gamma_{i\alpha_V}), \\ \gamma_{i\alpha_V} &= \varepsilon_{i\alpha_V} - \alpha_V \varepsilon_{i1} + \frac{T}{T_{1i}} \alpha_V \varepsilon_{i1}; \quad Q_i^V = \sum_{\alpha_V} S_{i\alpha_V} \exp(-\gamma_{i\alpha_V}), \quad (9.55) \\ \varepsilon_{i\alpha_V} &= \frac{E_{i\alpha_V}}{kT}; \quad \varepsilon_{i1} = \frac{E_{i1}}{kT}; \quad T_{1i} = T_{1i}(\mathbf{r}, t). \end{aligned}$$

Комментарии

1. С учетом допущения 4 квазистационарное распределение относительных заселенностей по энергиям молекул имеет вид

$$\bar{y}_{i\alpha} \equiv \frac{S_{i\alpha_R} S_{i\alpha_V}}{Q_i^R(T) Q_i^V(T, T_{1i})} \exp(-\varepsilon_{i\alpha_R} - \gamma_{i\alpha_V}); \quad \alpha = \alpha_R \alpha_V. \quad (9.56)$$

2. Из определения (9.37) и формулы (9.55) следует, что здесь газодинамическая переменная $\sigma = T_{1i}$.

Обозначения

E_{i1} — энергия первого колебательного уровня молекул компонента i

T_{1i} — условная температура первого колебательного уровня компонента i

$S_{i\alpha_V}$ — статистический вес для колебаний

$Q_i^V(T, T_{1i})$ — статистическая сумма по колебательным состояниям молекул компонента i .

Газодинамические переменные: n_i , \mathbf{v} , T , T_{1i} .

Газодинамические переменные вычисляются по функциям распределения в нулевом приближении:

$$n_i = \sum_{\alpha} \int f_{i\alpha}^{(0)} d\mathbf{c}_i; \quad \mathbf{v} = \frac{1}{\rho} \sum_{i\alpha} m_i \int \mathbf{c}_i f_{i\alpha}^{(0)} d\mathbf{c}_i; \quad \alpha = \alpha_R \alpha_V, \quad (9.57a)$$

$$\frac{1}{n} \sum_{i\alpha} \int \left(\frac{m_i}{2} C_i^2 + E_{i\alpha_R} + E_{i\alpha_V} \right) f_{i\alpha}^{(0)} d\mathbf{C}_i = \frac{3}{2} kT + \mathcal{E}_R(T) + \sum_i \mathcal{E}_{Vi}(T, T_{1i}), \quad (9.57b)$$

где колебательная энергия $\mathcal{E}_{Vi}(T, T_{1i})$ равна

$$\mathcal{E}_{Vi}(T, T_{1i}) = \frac{1}{Q_i^V(T, T_{1i})} \sum_{\alpha_V} S_{i\alpha_V} E_{i\alpha_V} \exp(-\gamma_{i\alpha_V}), \quad (9.57b)$$

а среднее число колебательных квантов в молекулах компонента i равно

$$w_i = \frac{1}{\rho_i} \sum_{\alpha} \alpha_V \int f_{i\alpha}^{(0)} d\mathbf{C}_i = \frac{1}{m_i Q_i^V(T, T_{1i})} \sum_{\alpha_V} \alpha_V S_{i\alpha_V} \exp(-\gamma_{i\alpha_V}). \quad (9.58)$$

Выражения (9.57), (9.58) определяют температуры T, T_{1i} .

Система уравнений газодинамики

В отличие от п. 9.2.3, где рассмотрена среда с колебательно-химической релаксацией, вместо системы уравнений относительных заселенностей (8.36) справедлива более простая система уравнений для средних чисел колебательных квантов:

$$\frac{d\rho_i w_i}{dt} + \rho_i w_i \nabla \cdot \mathbf{v} + \nabla \cdot \mathbf{q}_i^w = R_i^w, \quad (9.59)$$

где плотность потока числа колебательных квантов в молекулах компонента i равна

$$\mathbf{q}_i^w = \sum_{\alpha_R \alpha_V} \alpha_V \int \mathbf{C}_i f_{i\alpha_R \alpha_V}^{(1)} d\mathbf{C}_i = \sum_{\alpha_V} \alpha_V n_{i\alpha_V} \mathbf{V}_{i\alpha_V}, \quad (9.60)$$

$$\mathbf{V}_{i\alpha_V} = \frac{1}{n_{i\alpha_V}} \sum_{\alpha_R} n_{i\alpha_R \alpha_V} \mathbf{V}_{i\alpha_R \alpha_V}, \quad n_{i\alpha_V} = n_i \bar{y}_{i\alpha_V}. \quad (9.61)$$

Величина R_i^w определяется операторами столкновений для медленных процессов (VV₂- и TRV-обменами колебательной энергии и химическими реакциями):

$$R_i^w = \sum_{\alpha} \alpha_V \int J_{i\alpha}^{\text{sl}} d\mathbf{C}_i.$$

Вычисление правой части этой формулы аналогично вычислению правой части первой формулы (9.50).

Векторные переносные свойства

Вместо формулы (9.55) имеем

$$\nabla \ln \bar{y}_{i\alpha} = \frac{d \ln y_{i\alpha R}^B(T)}{dT} \nabla T + \frac{\partial \ln \bar{y}_{i\alpha V}(T, T_{1i})}{\partial T} \nabla T + \frac{\partial \ln \bar{y}_{i\alpha V}(T, T_{1i})}{\partial T_{1i}} \nabla T_{1i}, \quad (9.62)$$

так что в выражениях для векторных переносных свойств наряду с градиентом температуры ∇T входят градиенты ∇T_{1i} . Дальнейшие преобразования аналогичны преобразованиям разд. 9.2.1 с учетом формул (9.55), (9.56), (9.58), (9.60)–(9.62).

Комментарии

1. Распределение (9.55) по колебательной энергии молекул — квазистационарное распределение Тринора для многокомпонентной смеси (см. модель V.2, введение, [2]) — обусловлено существованием дополнительного инварианта столкновений при VV_1 -обмене: сохранение общего числа колебательных квантов в системе сталкивающихся частиц компонента i .

2. В условиях, когда ангармоничностью колебаний можно пренебречь (молекулы — гармонические осцилляторы) [21], VV_1 -обмены являются резонансными, дополнительный аддитивный инвариант столкновений — колебательная энергия. Распределение Тринора переходит в больцмановское распределение с колебательной температурой $T_{iV} = T_{1i}$, если $\gamma_{i\alpha V} = \alpha_V(T/T_{1i})\varepsilon_{1i}$. При этом уравнение (9.59) для w_i сводится к уравнению для колебательной энергии компонента i (см. уравнение (8.40)).

3. Уравнения для определения $f_{i\alpha R\alpha V}^{(1)}$ имеют громоздкий вид, особенно для определения объемной вязкости и релаксационного давления [21].

4. Теория процессов переноса рассмотрена в [21, 27, 28]. В монографии [21] дано сравнение коэффициентов переноса и тепловых потоков, рассчитанных в различных приближениях.

5. При $T \ll T_{1i}$ распределение Тринора справедливо лишь на нижних уровнях. На средних и верхних уровнях следует использовать распределение Гордиеца (см. п. 10.2.5). Теория процессов переноса, основанная на этом распределении, построена в [27–30].

9.2.5. Переносные свойства бинарной смеси газов с резко различающимися массами частиц**Назначение модели**

Обоснование соотношений газодинамики для бинарной смеси газов с резко различающимися массами частиц при помощи модифицированного метода Чепмена–Энскога [31].

Д о п у щ е н и я

1. Массы частиц легкого (m) и тяжелого (M) газов резко различаются, так что $\varepsilon \equiv \sqrt{m/M} \ll 1$.

2. Значение малого параметра ε порядка числа Кнудсена, вычисленного по параметрам тяжелого компонента.

3. Характерные значения отношений n_m/n_M и T_m/T_M , а также отношений сечений столкновений частиц одинаковых и различных сортов по порядку величины равны единице.

4. Для безразмерных средних скоростей компонентов смеси справедливы оценки

$$\frac{u_l}{\sqrt{2kT_l/M}} \sim 1, \quad \frac{u_l}{\sqrt{2kT_l/m}} \sim \varepsilon \ll 1.$$

5. Характерное значение отношения собственных скоростей тяжелых и легких частиц много меньше единицы:

$$\frac{C_M}{C_m} = O(\varepsilon) \ll 1.$$

6. Внешние силы отсутствуют.

О б о з н а ч е н и я

\mathbf{C}_l — собственные скорости частиц, отсчитываемые от средней скорости тяжелого компонента

\mathbf{u}_l — средние скорости частиц компонентов смеси

\mathbf{w} — разность средних скоростей частиц компонентов смеси

n_l — концентрации частиц компонентов смеси

T_l — температуры компонентов смеси

p_l — парциальные давления компонентов смеси

f_l — функции распределения по собственным скоростям частиц компонентов смеси

J_{mm}, J_{MM} — интегралы столкновений частиц одного компонента

J_{mM}, J_{Mm} — интегралы столкновений частиц разных компонентов.

О п р е д е л е н и я

Собственные скорости частиц, отсчитываемые от средней скорости

$$\mathbf{C}_l = \mathbf{c}_l - \mathbf{u}_M, \quad l = M, m.$$

Средние скорости частиц компонентов смеси

$$\mathbf{u}_l = \frac{1}{n_l} \int f_l^{(0)} \mathbf{C}_l d\mathbf{C}_l.$$

Разность средних скоростей частиц компонентов смеси

$$\mathbf{w} = \mathbf{u}_m - \mathbf{u}_M.$$

Концентрации частиц компонентов l смеси

$$n_l = \int f_l^{(0)} d\mathbf{C}_l.$$

Температуры компонентов смеси

$$T_M = \frac{M}{3kn_M} \int f_M^{(0)} C_M^2 d\mathbf{C}_M, \quad T_m = \frac{m}{3kn_m} \int f_m^{(0)} C_m^2 d\mathbf{C}_m.$$

Парциальные давления компонентов смеси

$$p_l = n_l k T_l.$$

Функции распределения по собственным скоростям частиц компонентов смеси

$$f_l \equiv f(\mathbf{C}_l, \mathbf{r}, t).$$

Интегралы столкновений частиц одного компонента

$$J_{mm} \equiv J(f_m, f_m), \quad J_{MM} \equiv J(f_M, f_M).$$

Интегралы столкновений частиц разных компонентов

$$J_{mM} \equiv J(f_m, f_M), \quad J_{Mm} \equiv J(f_M, f_m).$$

Кинетическое уравнение Больцмана для тяжелого компонента. Нулевое приближение

Через собственные скорости частиц кинетическое уравнение Больцмана записывается аналогично уравнению (3.5):

$$D_M(f_M) \equiv \frac{d_M f_M}{dt} + \mathbf{C}_M \cdot \nabla f_M - \frac{\partial f_M}{\partial \mathbf{C}_M} \mathbf{C}_M : \nabla \mathbf{u}_M - \frac{d_M \mathbf{u}_M}{dt} \cdot \frac{\partial f_M}{\partial \mathbf{C}_M} = J_{MM} + J_{Mm}, \quad (9.63)$$

где

$$\frac{d_M}{dt} \equiv \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{u}_M \cdot \nabla.$$

Уравнение для средней скорости \mathbf{u}_M

$$\rho_M \frac{d_M \mathbf{u}_M}{dt} + \nabla p_M + \nabla \cdot \boldsymbol{\pi}_M = \boldsymbol{\Phi} \equiv m \int \mathbf{C}_M J_{Mm} d\mathbf{C}_M. \quad (9.64)$$

Преобразование кинетического уравнения

Разложения перекрестного интеграла столкновений J_{Mm} и правой части $\boldsymbol{\Phi}$ уравнения (9.64) в ряды по ε имеют вид

$$J_{Mm} = J_{Mm}^{(0)} + J_{Mm}^{(1)} + J_{Mm}^{(2)} + \dots, \quad \boldsymbol{\Phi} = \boldsymbol{\Phi}^{(0)} + \boldsymbol{\Phi}^{(1)} + \boldsymbol{\Phi}^{(2)} + \dots, \quad (9.65)$$

где

$$J_{Mm}^{(0)} = 0; \quad \boldsymbol{\Phi}^{(0)} = 0, \quad (9.66a)$$

$$J_{Mm}^{(1)} = -\frac{1}{\rho_M} \boldsymbol{\Phi}^{(1)} \cdot \frac{\partial f_M}{\partial \mathbf{C}_M}, \quad (9.66б)$$

$$J_{Mm}^{(1)} \sim J_{MM}; \quad J_{Mm}^{(2)} \sim \varepsilon J_{MM}. \quad (9.66в)$$

Исключим в уравнении (9.63) величину $d_M \mathbf{u}_M / dt$ при помощи уравнения (9.64) с учетом соотношений (9.65), (9.66). В силу соотношения (9.66б) слагаемые левой и правой частей полученного уравнения, содержащие величину $\Phi^{(1)}$, сокращаются, и кинетическое уравнение (9.63) принимает вид

$$\begin{aligned} \frac{d_M f_M}{dt} + \mathbf{C}_M \cdot \nabla f_M - \frac{\partial f_M}{\partial \mathbf{C}_M} \mathbf{C}_M : \nabla \mathbf{u}_M + \\ + \frac{1}{\rho_M} \left(\nabla p_M + \nabla \cdot \boldsymbol{\pi}_M - \sum_{k=2}^{\infty} \Phi^{(k)} \right) \cdot \frac{\partial f_M}{\partial \mathbf{C}_M} - \sum_{k=2}^{\infty} J_{Mm}^{(k)} = J_{MM}. \end{aligned} \quad (9.67)$$

В безразмерных переменных правая часть уравнения (9.67) порядка $1/\varepsilon$, слагаемые левой части — порядка единицы и меньше. Поэтому в нулевом приближении по ε справедливо уравнение

$$J_{MM} \equiv J(f_M^{(0)}, f_M^{(0)}) = 0. \quad (9.68)$$

Решение уравнения

Решением уравнения (9.68) является максвелловская функция, выраженной через температуру тяжелого газа T_M :

$$f_M^{(0)} = n_M \left(\frac{M}{2\pi k T_M} \right)^{3/2} \exp \left(- \frac{M}{2k T_M} C_M^2 \right). \quad (9.69)$$

Кинетическое уравнение Больцмана для легкого компонента. Нулевое приближение

Это уравнение имеет вид

$$D_m(f_m) = J_{mm} + J_{mM}. \quad (9.70)$$

Левая часть уравнения (9.70) получается из левой части $D_M(f_M)$ уравнения (9.63) заменами $f_M \rightarrow f_m$, $\mathbf{C}_M \rightarrow \mathbf{C}_m$.

Преобразование кинетического уравнения

Разложение в ряд по степеням ε перекрестного интеграла столкновений J_{mM}

$$J_{mM} = J_{mM}^{(0)} + J_{mM}^{(1)} + J_{mM}^{(2)} + \dots, \quad (9.71)$$

где

$$J_{mM}^{(0)} = n_M \int [f_m(\mathbf{C}_0) - f_m(\mathbf{C}_m)] C_m b \, db \, d\varphi, \quad (9.72)$$

где $\mathbf{C}_0 = \mathbf{C}_m - 2(\mathbf{C}_m \cdot \mathbf{k})\mathbf{k}$, $|\mathbf{C}_m| = |\mathbf{C}_0|$, \mathbf{k} — единичный вектор вдоль линии центров сталкивающихся частиц;

$$J_{mM}^{(1)} = 0, \quad J_{mM}^{(2)} \sim \varepsilon^2. \quad (9.73)$$

Кинетическое уравнение (9.70) при учете разложения по ε

$$D_m(f_m) - \sum_{k=2}^{\infty} J_{mM}^{(k)} = J_{mm} + J_{mM}^{(0)}. \quad (9.74)$$

В безразмерных переменных правая часть уравнения (9.74) порядка $1/\varepsilon$, левая часть содержит слагаемые порядка ε и меньше. Следовательно, уравнение нулевого приближения по ε имеет вид

$$J_{mm} + J_{mM}^{(0)} \equiv J(f_m^{(0)}, f_m^{(0)}) + J^{(0)}(f_m^{(0)}) = 0. \quad (9.75)$$

Решение уравнения

Решением уравнения (9.75) является максвелловская функция, выраженная через температуру легкого компонента $T_m \neq T_M$

$$f_m^{(0)} = n_m \left(\frac{m}{2\pi k T_m} \right)^{3/2} \exp \left(- \frac{m}{2k T_m} C_m^2 \right). \quad (9.76)$$

Комментарии

1. Выражение (9.72) называется интегралом столкновений Лорентца, его величина порядка интеграла столкновений J_{mm} .

2. Из-за произвольности коэффициента n_M в выражении (9.72) для $J_{mM}^{(0)}$ слагаемые уравнения (9.75) равны нулю по отдельности. Решением уравнения $J_{mm} = 0$ является функция (9.76), которая тождественно обращает в нуль интеграл столкновений Лорентца $J_{mM}^{(0)}$.

Газодинамические переменные: \mathbf{u}_M , T_M , T_m .

Система уравнений газодинамики

Замкнутая система уравнений состоит из уравнений баланса концентраций частиц n_M и n_m , уравнений для средней скорости \mathbf{u}_M частиц компонента M и для температур компонентов T_m , T_M .

Переносные свойства бинарной смеси в первом приближении Чепмена–Энскога

Как и в классическом методе Чепмена–Энскога (гл. 4), для определения возмущений функций распределения левые части уравнений (9.67), (9.74) преобразуются с использованием нулевого приближения (9.69), (9.76), относительно которого линеаризуются правые части. Принципиальной особенностью этого метода определения возмущений является то, что правые части уравнений (9.67), (9.74) не содержат функций f_m , f_M соответственно, поэтому задачи вычисления возмущений функций распределения и, следовательно, переносных свойств тяжелого и легкого компонентов разделяются.

Переносные свойства тяжелого компонента

Переносные свойства тяжелого компонента даются формулами для однокомпонентного газа из частиц массой M , концентрация которых n_M , средняя скорость \mathbf{u}_M и температура T_M .

Тензор вязких напряжений тяжелого компонента

$$\pi_M = -2\eta(T_M)\mathbf{S}_M, \quad (9.77)$$

где тензор скоростей сдвига \mathbf{S}_M выражается через \mathbf{u}_M .

Вектор плотности теплового потока тяжелого компонента

$$\mathbf{q}_M = -\lambda(T_M)\nabla T_M. \quad (9.78)$$

Переносные свойства легкого компонента

Тензор вязких напряжений легкого компонента

$$\pi_m = -2\eta_m\mathbf{S}_m. \quad (9.79a)$$

Вектор плотности теплового потока легкого компонента

$$\mathbf{q}_m = -\lambda_m\nabla T_m + \frac{p_m}{k}\left(\frac{5}{2} + k_{Tm}\right)\mathbf{w}. \quad (9.79b)$$

Разность средних скоростей компонентов смеси

$$\mathbf{w} = -\frac{d_m}{\rho_m}(\nabla \ln p_m + k_{Tm}\nabla \ln T_m). \quad (9.79b)$$

Коэффициенты переноса легкого компонента η_m , λ_m , d_m , k_{Tm} зависят от температуры легкого компонента T_m , отношения n_m/n_M , сечений столкновений легких частиц с легкими и тяжелыми.

Комментарии

1. При сформулированных условиях в операторах столкновений частиц смеси газов содержатся слагаемые, различающиеся по порядку величины. Это обстоятельство позволяет использовать систему уравнений двухтемпературной газодинамики для описания переносных свойств. При анализе необходимо записать кинетическое уравнение для тяжелого компонента через собственные скорости тяжелых частиц \mathbf{S}_M и исключить производную $d_M \mathbf{u}_M/dt$ при помощи уравнения для средней скорости тяжелых частиц \mathbf{u}_M . Тогда в нулевом приближении решениями кинетических уравнений будут максвелловские функции с разными температурами.

2. Разность средних скоростей компонентов \mathbf{w} порядка средней скорости тяжелого компонента u_M . Относительное различие этой скорости и среднемассовой скорости смеси порядка ε^2 ([31]).

3. Основными диссипативными факторами являются теплопроводность и диффузия легкого компонента и релаксационные члены уравнений для температур.

4. Наиболее важным приложением газодинамики двухтемпературной среды является плазма, где легкая частица — электрон, а разность температур компонентов поддерживается электрическим полем. Сводка уравнений в различных приближениях и соответствующие выражения для соотношений и коэффициентов переноса приведены в гл. 11, 12.

Список литературы к главе 9

1. Галкин В. С., Коган М. Н., Макашев Н. К. Обобщенный метод Чепмена–Энскога // ДАН СССР. 1975. Т. 220, № 2. С. 304–307.
2. Kogan M. N., Galkin V. S., Makashev N. K. Generalized Chapman–Enskog method: derivation of the nonequilibrium gasdynamic equations // *Rar. Gas Dynam. Pap. 11th Intern. Sym., Cannes, 1978. V. 2. Paris, 1979.* P. 693–734.
3. Мацук В. А., Рыков В. А. О методе Чепмена–Энскога для смеси газов // Докл. АН СССР. 1977. Т. 233, № 1. С. 49–51.
4. Мацук В. А. О методе Чепмена–Энскога для химически реагирующей газовой смеси с учетом внутренних степеней свободы // Журн. вычисл. матем. и матем. физ. 1978. Т. 18, № 4. С. 1043–1048.
5. Галкин В. С., Коган М. Н., Макашев Н. К. Область применимости и основные особенности обобщенного метода Чепмена–Энскога // Изв. АН СССР. Мех. жидк. и газов. 1984. № 3. С. 126–136.
6. Коган М. Н., Макашев Н. К. О построении уравнений газодинамики для многоатомных газов с произвольным отношением скоростей упругих и неупругих процессов // Изв. АН СССР. Мех. жидк. и газов. 1978. № 2. С. 57–70.
7. Brun R. Transport properties of nonequilibrium gas flows // *Molecular Physics and Hypersonic Flows* / Ed. M. Capitelli. — Netherlands: Kluwer Acad. Publ., 1996. — P. 361–382.
8. Алексеев Б. В., Грушин И. Т. Процессы переноса в реагирующих газах и плазме. — М.: Энергоатомиздат, 1994. — 432 с.
9. Kogan M. N. Kinetic theory in aerothermodynamics // *Prog. Aerospace Sci.* 1992. V. 29. P. 271–354.
10. Галкин В. С. Соотношения Стефана–Максвелла в неравновесных смесях многоатомных реагирующих газов // Изв. РАН. Мех. жидк. и газов. 1997. № 6. С. 164–167.
11. Добкин С. В., Сон Э. Е. Процессы переноса в колебательно-возбужденном молекулярном газе // ЖПМТФ. 1987. № 2. С. 10–17.
12. Макашев Н. К. К выводу уравнений движения колебательно-возбужденных газов // Журн. вычисл. матем. и матем. физ. 1982. Т. 22, № 4. С. 913–925.
13. Колесниченко Е. Г. Вывод гидродинамических уравнений для многоатомных и химически реагирующих газов // ДАН СССР. 1978. Т. 240, № 1. С. 40–43.
14. Колесниченко Е. Г. О методике вывода гидродинамических уравнений для сложных систем // Изв. АН СССР. Мех. жидк. и газов. 1981. № 3. С. 96–109.

15. Колесниченко Е. Г. Неравновесные эффекты в динамике химически реагирующих газовых смесей // Физико-химическая кинетика в газовой динамике: Сб. — М.: Изд-во МГУ, 1986. — С. 80–100.
16. Макашев Н. К. О методах вывода уравнений газовой динамики в случае высокопороговых реакций // Журн. вычисл. матем. и матем. физ. 1986. Т. 26, № 10. С. 1512–1526.
17. Галкин В. С. Преобразование уравнений первого приближения Чепмена–Энскога и векторные соотношения переноса для смесей молекулярных газов // ПММ. 2007. Т. 71, вып. 2. С. 301–320.
18. Коган М. Н. Динамика разреженного газа. — М.: Наука, 1967. — 440 с.
19. Валландер С. В., Нагнибеда Е. А., Рыдалевская М. А. Некоторые вопросы кинетической теории химически реагирующей смеси газов. — Л.: Изд-во ЛГУ, 1977. — 280 с.
20. Рыдалевская М. А. Статистические и кинетические модели в физико-химической газодинамике. — СПб.: Изд-во СПбГУ, 2003. — 246 с.
21. Нагнибеда Е. А., Кустова Е. В. Кинетическая теория процессов переноса и релаксации в неравновесных потоках реагирующих газов. — СПб.: Изд-во СПбГУ, 2004. — 270 с.
22. Kustova E. V., Nagnibeda E. A. Transport properties of a reacting gas mixture with strong vibrational and chemical nonequilibrium // Chem. Phys. 1998. V. 233. P. 57–75.
23. Кустова Е. В., Нагнибеда Е. А. Поуровневое описание течений газа с сильной колебательной и химической неравновесностью // Мат. моделирование. 1999. Т. 11, № 2. С. 89–104.
24. Кустова Е. В., Нагнибеда Е. А. Определение скоростей диссоциации, рекомбинации и переходов колебательной энергии в приближении поуровневой кинетики // Аэродинамика/Под ред. Р. Н. Мирошина. 2000. С. 57–81.
25. Brun D., Capitelli M., Kustova E. et al. Non-equilibrium vibrational distribution and transport coefficients of $N_2(v) - N$ mixtures // Chem. Phys. Lett. 1999. V. 308. P. 463–472.
26. Kustova E. V. On the simplified state-to-state transport coefficients // Chem. Physics. 2001. V. 270, № 1. P. 177–195.
27. Chikhaoui A., Dudon J. P., Kustova E. V. et al. Transport properties in reacting mixture of polyatomic gases // Physica A. 1997. V. 247, № 1–4. P. 526–552.
28. Chikhaoui A., Dudon J. P., Genieys S. et al. Multi-temperature kinetic model for heat transfer in reacting gas mixture // Phys. Fluids. 2000. V. 12, № 1. P. 220–232.
29. Kustova E. V., Nagnibeda E. A. Strong nonequilibrium effects on specific heats and thermal conductivity of diatomic gas // Chem. Physics. 1996. V. 208, № 3. P. 313–329.
30. Кустова Е. В., Нагнибеда Е. А. Колебательная кинетика и процессы переноса в сильно неравновесном газе // Изв. РАН. Мех. жидк. и газов. 1997. № 5. С. 150–160.
31. Галкин В. С. К выводу уравнений двухтемпературной газодинамики модифицированным методом Чепмена–Энскога // Изв. АН СССР. Мех. жидк. и газов. 1981. № 1. С. 58–63.

Глава 10

ПРИБЛИЖЕННЫЕ ВЫРАЖЕНИЯ ДЛЯ ПЕРЕНОСНЫХ СВОЙСТВ ПРИ РАЗЛИЧНЫХ ОТКЛОНЕНИЯХ ОТ ЛОКАЛЬНОГО РАВНОВЕСИЯ ПО ВНУТРЕННИМ СТЕПЕНЯМ СВОБОДЫ

При учете неупругих столкновений частиц коэффициенты переноса даются громоздкими выражениями, имеющими формальный характер из-за недостаточности сведений о сечениях этих столкновений. Поэтому обычно применяются упрощенные выражения, обладающие приемлемой точностью. В разд. 10.1 излагается методика вывода этих выражений, в разд. 10.2 рассматриваются частные случаи. В разд. 10.3 эта методика уточняется путем учета неупругих столкновений с RT- и RR-обменами. Объемная вязкость и релаксационное давление не рассматриваются.

10.1. Неравновесное приближение Гиршфельдера–Эйкена

Назначение

Приближенный учет влияния внутренних степеней свободы молекул на векторные переносные свойства смеси газов на основе результатов п. 9.1.4.

Допущения

1. Пренебрегается линеаризованными операторами неупругих столкновений по сравнению с оператором упругих столкновений в левых частях систем уравнений (9.4) для возмущений $\varphi_{i\alpha}^{(I)}$, $\varphi_{i\alpha}^{(II)}$, определяющих динамическую вязкость и векторные переносные свойства соответственно. α_I — процессы отсутствуют, $\alpha_{II} \equiv \alpha = \alpha_R \alpha_V \alpha_{эл}$.

2. Дифференциальные сечения упругих столкновений молекул не зависят от их внутренних состояний (по этим состояниям проведено усреднение): $\sigma_{i\alpha j\beta}^{i\alpha j\beta} = \sigma_{ij}$.

Обозначения

$f_i^{(0)}$ — локально максвелловская функция распределения частиц компонента i

\mathbf{W}_{ti} — безразмерная собственная скорость частицы компонента i , отнесенная к ее наиболее вероятной скорости

E_i — энергия i -го компонента смеси газов, обусловленная внутренней энергией частиц и их энергией образования

$\varphi_i^{(\text{I})}$ — тензорное (по \mathbf{C}_i) возмущение функции распределения для N -компонентной смеси атомарных газов

$\varphi_i^{(\text{II})}$ — векторное (по \mathbf{C}_i) возмущение функции распределения для N -компонентной смеси атомарных газов

$[\mathcal{D}_{ij}]_1$ — коэффициент бинарной диффузии атомарных газов в первом приближении по полиномам Сонина

$[\mathcal{D}_{ii}]_1$ — коэффициент самодиффузии i -го атомарного газа в указанном приближении

λ — коэффициент теплопроводности атомарного газа

\mathcal{D} — коэффициент самодиффузии атомарного газа

σ_{ij} — дифференциальное сечение упругих столкновений частиц компонентов i и j

Q_i — функции, учитывающие перенос внутренней энергии в векторном возмущении функции распределения

\mathbf{q}^{int} — вектор плотности теплового потока, обусловленного переносом внутренней энергии.

Определения

Функция распределения частиц сорта $i\alpha$ по собственным скоростям в нулевом приближении

$$f_{i\alpha}^{(0)} = y_{i\alpha} f_i^{(0)}.$$

Локально максвелловская функция распределения частиц компонента i

$$f_i^{(0)} = n_i \left(\frac{m_i}{2\pi k T_t} \right)^{3/2} \exp(-W_{ti}^2).$$

Безразмерная собственная скорость частицы компонента i , отнесенная к ее наиболее вероятной скорости

$$\mathbf{W}_{ti} = \sqrt{\frac{m_i}{2kT_t}} \mathbf{C}_i.$$

Энергия i -го компонента смеси газов, обусловленная внутренней энергией частиц и их энергией образования

$$E_i = \sum_{\alpha} (E_{i\alpha} + E_i^{\text{ch}}) y_{i\alpha}.$$

10.1.1. Выражения для возмущений $\varphi_{i\alpha}^{(I)}$, $\varphi_{i\alpha}^{(II)}$ и переносные свойства

При сделанных допущениях [1] выражения для возмущений имеют вид

$$\varphi_{i\alpha}^{(I)} = \varphi_i^{(I)}; \quad \varphi_{i\alpha}^{(II)} = \varphi_i^{(II)} - Q_i \mathbf{C}_i \cdot \nabla \ln y_{i\alpha}, \quad (10.1)$$

как следует из формул (9.22).

Переносные свойства

Бездивергентный тензор напряжений

$$\boldsymbol{\pi} = \sum_i m_i \int f_i^{(0)} \varphi_i^{(I)} \left(\mathbf{C}_i \mathbf{C}_i - \frac{1}{3} \delta C_i^2 \right) d\mathbf{C}_i = -2\eta \mathbf{S}. \quad (10.2)$$

Вектор диффузионной скорости частиц компонента i

$$\mathbf{V}_i = \frac{1}{n_i} \int f_i^{(0)} \varphi_i^{(II)} \mathbf{C}_i d\mathbf{C}_i = - \sum_j D_{ij} \mathbf{d}_j - D_{Ti} \nabla \ln T. \quad (10.3)$$

Вектор плотности полного теплового потока

$$\mathbf{q} = \mathbf{q}_t + \mathbf{q}^{\text{int}}. \quad (10.4)$$

Вектор плотности теплового потока, обусловленного переносом поступательной энергии частиц

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_t = \sum_i \int f_i^{(0)} \varphi_i^{(II)} \mathbf{C}_i \frac{m_i}{2} C_i^2 d\mathbf{C}_i = -\lambda' \nabla T - p \sum_i D_{Ti} \mathbf{d}_i + \\ + \frac{5}{2} p \sum_i x_i \mathbf{V}_i = -\lambda \nabla T + p \sum_i \left(k_{Ti} + \frac{5}{2} x_i \right) \mathbf{V}_i. \end{aligned} \quad (10.5)$$

Соотношение Стефана–Максвелла для частиц компонента i

$$\mathbf{d}_i = \sum_j \alpha_{ij} (\mathbf{V}_j - \mathbf{V}_i) - k_{Ti} \nabla \ln T. \quad (10.6)$$

Комментарии

1. Приведенные выражения для бездивергентного тензора напряжений $\boldsymbol{\pi}$, вектора диффузионной скорости \mathbf{V}_i , вектора плотности теплового потока \mathbf{q}_t , обусловленного переносом кинетической энергии частиц, и соотношения Стефана–Максвелла для компонента i получаются суммированием общих выражений гл. 9 по α . Они определяются первыми членами формул (10.1).

2. Эти выражения для переносных свойств и выражения для коэффициентов переноса η , D_{ij} , D_{Ti} , λ' , λ , k_{Ti} , α_{ij} вычисляются по соответствующим формулам разд. 4.1 для N -компонентной смеси

атомарных газов. Расчетные формулы для этих коэффициентов переноса даны в гл. 5.

3. Входящие в эти формулы интегральные сечения столкновений определяются путем осреднения сечений столкновений по квантовым состояниям и ориентациям взаимодействующих частиц [2, 3].

4. Векторы диффузионной скорости $\mathbf{V}_{i\alpha}$ и плотности теплового потока \mathbf{q}^{int} , обусловленного переносом внутренней энергии частиц (с учетом энергии образования), определяются с использованием второго слагаемого формулы (10.1) для $\varphi_{i\alpha}^{(\Pi)}$, так что они выражаются через функции $Q_i(W_{ti}^2)$ (см. также выражение (10.23)).

10.1.2. Система уравнений для функций Q_i

Для функций Q_i , входящих в выражение (10.1) для возмущений $\varphi_{i\alpha}^{(\Pi)}$, имеет место система уравнений

$$\sum_j \int f_i^{(0)} f_j^{(0)} (Q'_i \mathbf{C}'_i - Q_i \mathbf{C}_i) g_{ij} \sigma_{ij} d\Omega d\mathbf{C}_j = -f_i^{(0)} \mathbf{C}_i, \quad (10.7)$$

$$Q_i = Q(W_{ti}^2); \quad Q'_i = Q(W_{ti}'^2); \quad i, j = 1, 2, \dots, N.$$

Комментарий

Система (10.7) получается упрощением системы (9.23): в левой части уравнений (9.23) опускается оператор неупругих столкновений, проводится суммирование по α_1 с учетом допущения 2 и формулы $\sum_{\alpha_1} f_{i\alpha_1}^{(0)} = f_i^{(0)}$.

Решение системы уравнений (10.7) в виде ряда по полиномам Сонина

$$Q_i = \sum_{r=0}^{\xi-1} q_i^{(r)}(\xi) S_{3/2}^{(r)}(W_{ti}^2); \quad \xi = 1, 2, \dots \quad (10.8)$$

Аналогично методике разд. 4.1, после подстановки выражений (10.8) в систему уравнений (10.7), умножения на $\mathbf{C}_i S_{3/2}^{(m)}(W_{ti}^2)$, $m \geq 0$ и интегрирования по собственным скоростям частиц получается система алгебраических уравнений для коэффициентов $q_i^{(r)}$. Решение этой системы уравнений дает следующие значения коэффициента $q_i^{(0)}$: при учете только первого члена ряда (10.8), т. е. при $\xi = 1$ [1, 4],

$$[q_i^{(0)}]_1 = \frac{m_i}{kT_t} \left(\sum_j \frac{x_j}{[D_{ij}]_1} \right)^{-1}, \quad (10.9)$$

при учете двух членов ряда (10.8), т. е. при $\xi = 2$ [4],

$$[q_i^{(0)}]_2 = [q_i^{(0)}]_1 (1 - \delta_i)^{-1},$$

$$\delta_i = \frac{5}{4} \left\{ \sum_j \frac{x_j \mu_{ji}}{[\mathcal{D}_{ij}]_1} \left(1 - \frac{2}{5} \frac{\Omega_{ij}^{(1,2)}}{\Omega_{ij}^{(1,1)}} \right) \right\}^2 \left\{ \sum_j \frac{x_j}{[\mathcal{D}_{ij}]_1} \sum_j \frac{x_j \mu_{ji}^2 R_{ij}}{[\mathcal{D}_{ij}]_1} \right\}^{-1}, \quad (10.10)$$

$$R_{ij} = \frac{1}{4} \left(5 + 6 \frac{m_i^2}{m_j^2} \right) + \frac{1}{5} \left(\Omega_{ij}^{(1,3)} - 5 \Omega_{ij}^{(1,2)} + 2 \frac{m_i}{m_j} \Omega_{ij}^{(2,2)} \right) / \Omega_{ij}^{(1,1)},$$

$$\mu_{ji} = m_j (m_i + m_j)^{-1}.$$

Интегралы $\Omega_{ij}^{(1,1)}$, $\Omega_{ij}^{(1,2)}$, $\Omega_{ij}^{(2,2)}$, $\Omega_{ij}^{(1,3)}$ определены в гл. 6.

Переносные свойства

Вектор диффузионной скорости частиц сорта $i\alpha$

$$\mathbf{V}_{i\alpha} = \frac{1}{n_{i\alpha}} (y_{i\alpha} n_i \mathbf{V}_i - \sigma_i \nabla y_{i\alpha}). \quad (10.11)$$

Вектор плотности теплового потока за счет переноса внутренней энергии частиц и энергии их образования

$$\mathbf{q}^{\text{int}} = \sum_{i\alpha} (E_{i\alpha} + E_i^{\text{ch}}) n_{i\alpha} \mathbf{V}_{i\alpha} = \sum_i E_i n_i \mathbf{V}_i - \sum_{i\alpha} E_{i\alpha} \sigma_i \nabla y_{i\alpha}. \quad (10.12)$$

Дополнительное соотношение Стефана–Максвелла для частиц сорта $i\alpha$

$$\nabla y_{i\alpha} = - \frac{n_{i\alpha}}{\sigma_i} (\mathbf{V}_{i\alpha} - \mathbf{V}_i). \quad (10.13)$$

Диффузионная скорость частиц компонента i

$$\mathbf{V}_i = \frac{1}{n_i} \sum_{\alpha} n_{i\alpha} \mathbf{V}_{i\alpha}. \quad (10.14)$$

Коэффициенты переноса

Коэффициент диффузии заселенностей σ_i

$$\sigma_i = \frac{1}{3} \int f_i^{(0)} Q_i C_i^2 d\mathbf{C}_i = \frac{n_i}{m_i} kT_t q_i^{(0)}. \quad (10.15)$$

Приближенные значения коэффициента диффузии заселенностей σ_i

$$[\sigma_i]_{\xi} = \frac{n_i}{m_i} kT_t [q_i^{(0)}]_{\xi}; \quad \xi = 1, 2, \quad (10.16)$$

где множитель $[q_i^{(0)}]_{\xi}$ дается формулами (10.9), (10.10) для $\xi = 1$ и 2 соответственно.

Комментарий

Анализ максимальных погрешностей замены точного значения коэффициента σ_i на приближенные величины $[\sigma_i]_1$, $[\sigma_i]_2$ проведен в [4]. При отношении масс нейтральных частиц порядка единицы достаточную точность дает применение коэффициента $[\sigma_i]_1$.

10.2. Переносные свойства газов с возбуждением различных внутренних степеней свободы (частные случаи)

10.2.1. Правила перехода к частным случаям

1. Значения относительных заселенностей $y_{i\alpha}$ заменяются на их квазистационарные значения $\bar{y}_{i\alpha}$, в частности на больцмановскую функцию $y_{i\alpha}^B$.

2. В качестве значений $\bar{y}_{i\alpha}$ могут быть использованы эмпирические выражения для нее.

3. Поступательная температура T_t заменяется на температуру T , определяемую с учетом энергии внутренних степеней свободы молекул для быстрых неупругих процессов. Если эта замена не производится, то слагаемые, аналогичные объемной вязкости и релаксационному давлению, появляются в выражении для внутренней энергии газа (см. разд. 8.4).

4. Разница между температурами T_t и T определяется объемной вязкостью и релаксационным давлением (см. разд. 8.4). Если последними пренебрегается, то $T_t = T$.

Обозначения

$y_{i\alpha}^B(T)$ — больцмановская функция распределения частиц сорта $i\alpha$ по внутренней энергии молекул $E_{i\alpha}$

y_α^B — больцмановская функция распределения для однокомпонентного газа (опускается индекс i)

c_{Vi}^R, c_{Vi}^V — удельная вращательная и колебательная теплоемкости при постоянном объеме компонента i

$c_{Vi}^T, c_{Vi}^{T_1}$ — неравновесные удельные колебательные теплоемкости компонента i (см. ниже (10.24)).

Определение

Больцмановская функция распределения частиц сорта $i\alpha$ по внутренней энергии молекул $E_{i\alpha}$

$$y_{i\alpha}^B = \frac{S_{i\alpha}}{Q_i} \exp(-\varepsilon_{i\alpha}).$$

10.2.2. Молекулярный газ, быстрые обмены

Допущение

Относительная заселенность $y_\alpha = y_\alpha^B(T)$ является больцмановской функцией температуры T .

Обозначения

λ , \mathcal{D} — коэффициенты теплопроводности и самодиффузии однокомпонентного газа

c_V — теплоемкость, обусловленная внутренними степенями свободы частиц

$n\mathcal{D}c_V$ — модифицированная поправка Эйкена [2].

Переносные свойства

Вектор плотности полного теплового потока

$$\mathbf{q} = -(\lambda + n\mathcal{D}c_V)\nabla T. \quad (10.17)$$

10.2.3. Смесь молекулярных газов, быстрые обмены

Допущение

Относительная заселенность $y_{i\alpha} = y_{i\alpha}^B(T)$ является бoльцмановской функцией температуры T .

Переносные свойства

Вектор плотности теплового потока, обусловленный переносом внутренней энергии частиц

$$\mathbf{q}^{\text{int}} = \sum_i E_i n_i V_i - \sum_i n_i [\mathcal{D}_{ii}]_1 c_{Vi} \left(\sum_j \frac{x_j [\mathcal{D}_{ii}]_1}{[\mathcal{D}_{ij}]_1} \right)^{-1} \nabla T, \quad (10.18)$$

$$\text{где } c_{Vi} = \frac{dE_i(T)}{dT}, \quad E_i = \sum_{\alpha} E_{i\alpha} y_{i\alpha}^B(T).$$

Комментарии

1. Используется значение коэффициента диффузии заселенностей σ_i в первом приближении по полиномам Сонина $[\sigma_i]_1$ (см. формулу (10.15)).

2. Коэффициент при ∇T является поправкой Гиршфельдера–Эйкена к коэффициенту теплопроводности смеси молекулярных газов. Точность поправки улучшается при замене величины $n_i [\mathcal{D}_{ii}]_1 c_{Vi}$ на $\lambda_i - \lambda_i^d$ [3], где λ_i — экспериментальное или расчетное значение коэффициента теплопроводности, λ_i^d — его расчетное значение без учета влияния внутренних степеней свободы частиц. При большой температуре величина λ_i неизвестна и эта замена не производится.

3. Для реагирующей смеси газов (разд. 4.3) температура T определяется с учетом энергии образования частиц E_i^{ch} , концентрации компонентов смеси газов n_i выражаются через газодинамические переменные T , n_d или через переменные T , γ_d (см. формулы (4.68) или (4.85) соответственно).

4. Соотношения (10.17), (10.18) обычно используются в газодинамике высокотемпературных сред [5]. Анализ применимости формулы (10.17), т.е. точности учета влияния внутренних степеней свободы

молекул на теплопроводность при помощи модифицированной поправки Эйкена, для N_2 , O_2 , NO , CO , CO_2 , N_2O , CH_4 , CF_4 , SF_6 при $T \approx 100-3000$ К дан в [6].

10.2.4. Смесь молекулярных газов, колебательно-химическая релаксация

Д о п у щ е н и я

1. Предполагается, что вращательная энергия $E_{i\alpha_R}$ не зависит от колебательного состояния молекул.

2. Относительные заселенности колебательно-вращательных уровней, вращательных уровней молекул и энергия вращательного возбуждения заданы формулами

$$y_{i\alpha} = y_{i\alpha_R}^B(T) y_{i\alpha_V}, \quad y_{i\alpha_R}^B = \frac{S_{i\alpha_R}}{Q_i^R} \exp(-\varepsilon_{i\alpha_R}), \quad \varepsilon_{i\alpha_R} = \frac{E_{i\alpha_R}}{kT}. \quad (10.19)$$

Переносные свойства

Вектор диффузионной скорости частиц сорта $i\alpha$ в колебательно-возбужденном состоянии α_V

$$\mathbf{V}_{i\alpha_V} = \frac{1}{n_{i\alpha_V}} (y_{i\alpha_V} n_i \mathbf{V}_i - \sigma_i \nabla y_{i\alpha_V}). \quad (10.20a)$$

Вектор плотности теплового потока, обусловленного переносом внутренней энергии частиц

$$\mathbf{q}^{\text{int}} = \sum_i E_i n_i \mathbf{V}_i - \sum_i c_{Vi}^R \sigma_i \nabla T - \sum_{i\alpha_V} E_{i\alpha_V} \sigma_i \nabla y_{i\alpha_V}. \quad (10.20б)$$

О п р е д е л е н и я

Вращательная теплоемкость при постоянном объеме

$$c_{Vi}^R = \frac{d}{dT} \sum_{\alpha_R} E_{i\alpha_R} y_{i\alpha_R}^B(T). \quad (10.21)$$

Внутренняя энергия

$$E_i = E_i^{\text{ch}} + \sum_{\alpha_R} E_{i\alpha_R} y_{i\alpha_R}^B(T) + \sum_{\alpha_V} E_{i\alpha_V} y_{i\alpha_V}. \quad (10.22)$$

10.2.5. Смесь газов с различными колебательными температурами компонентов. Быстрые обмены колебательными квантами, ангармонические осцилляторы

Д о п у щ е н и е

Относительная заселенность дается формулой (10.19), где в данном случае $y_{i\alpha_V} = \bar{y}_{i\alpha_V}(T, T_{1i})$ — триновское распределение по колебательной энергии (см. формулы (9.55), (9.56)); T_{1i} — условная температура первого колебательного уровня молекул компонента i .

Переносные свойства

Вектор плотности теплового потока внутренней энергии частиц

$$\mathbf{q}^{\text{int}} = \sum_i E_i n_i \mathbf{V}_i - \sum_i \sigma_i (c_{Vi}^R + c_{Vi}^T) \nabla T - \sum_i \sigma_i c_{Vi}^{T_1} \nabla T_{1i}. \quad (10.23)$$

Вектор плотности потока числа колебательных квантов в молекулах компонента i (см. выражение (9.60))

$$\mathbf{q}_i^{VV} = \sum_{\alpha V} \alpha_V (\bar{y}_{i\alpha V} n_i \mathbf{V}_i - \sigma_i \nabla \bar{y}_{i\alpha V}). \quad (10.24)$$

В формуле (10.23) теплоемкость c_{Vi}^R определена формулой (10.21), а колебательные теплоемкости — формулами

$$c_{Vi}^T = \frac{\partial}{\partial T} E_i^V(T, T_{1i}), \quad c_{Vi}^{T_1} = \frac{\partial}{\partial T_{1i}} E_i^V(T, T_{1i}), \quad (10.25)$$

$$E_i^V = \sum_{\alpha V} E_{i\alpha V} \bar{y}_{i\alpha V}.$$

Комментарии

1. При $T_1/T < 1$ триноровское распределение может быть использовано для всех колебательных уровней. При сильном колебательном возбуждении ($T_1/T > 1$) оно описывает заселенности лишь нижних уровней.

2. В условиях, когда ангармоничность колебаний пренебрежимо мала, распределение по колебательной энергии является больцмановским. Тогда $\bar{y}_{i\alpha V} = y_{i\alpha V}^B(T_{iV})$, где T_{iV} — колебательная температура i -го компонента. В формуле (10.23) нужно положить $c_{Vi}^T \equiv 0$, а $c_{Vi}^{T_1} \nabla T_{1i}$ заменить на $c_{Vi}^V(T_{iV}) \nabla T_{iV}$.

10.2.6. Однокомпонентный газ двухатомных молекул. Сильное колебательное возбуждение

Допущения

1. Распределение по вращательной энергии — больцмановское.
2. При сильном колебательном возбуждении заселены не только нижние, но и средние и верхние колебательные уровни, поэтому необходимо учитывать ангармоничность молекулярных колебаний.
3. На разных группах уровней к быстрым относятся разные колебательные обмены. На нижних это нерезонансный VV' -обмен колебательными квантами ($v_2 + v'_2 = (v_2 \pm w) + (v'_2 \mp w)$), где v_2, v'_2 — колебательные квантовые числа участвующих в VV' -обмене частиц, w — число переданных при обмене квантов. На средних уровнях — резонансный VV'' -обмен квантами между соседними уровнями ($v_2 + (v_2 \pm 1) = (v_2 \pm 1) + v_2$), на верхних — все VV - и VT -обмены.

Характерные времена колебательного энергообмена удовлетворяют условиям

$$\begin{aligned}\tau_{VV'} &\leq \tau_{VT} \sim t_*; & 0 \leq \alpha_V \leq i_*, \\ \tau_{VV''} &\leq \tau_{VT} \sim t_*; & 0 \leq \alpha_V \leq i_{**}, \\ \tau_{VV} &\sim \tau_{VT} \ll t_*; & 0 \leq \alpha_V \leq L,\end{aligned}$$

где i_* , i_{**} — первое и второе числа Тринора; L — номер колебательного уровня, соответствующий порогу диссоциации. Величина i_* соответствует минимуму триноровского распределения, i_{**} определяется с учетом того, что при $\alpha_V > i_{**}$ вероятности VV- и VT-обмена сравнимы по порядку величины.

4. Химические реакции отсутствуют и электронные уровни не возбуждены.

5. Аддитивными инвариантами межмолекулярных столкновений на всех уровнях являются масса, импульс и полная энергия; дополнительный инвариант на нижних уровнях — число колебательных квантов (как и в предыдущем случае); на средних — любая величина, не зависящая от скорости и вращательного уровня и произвольно зависящая от α_V .

6. Относительная заселенность дается формулой (10.19), в которой опускается индекс i . Относительные заселенности колебательных уровней имеют вид триноровского распределения на нижних уровнях, пологого плато на средних и больцмановского на верхних уровнях.

Относительная заселенность колебательных уровней

Относительная заселенность колебательных уровней равна

$$y_\alpha = y_{\alpha_R}^B(T) \bar{y}_{\alpha_V}(T, T_1),$$

$$\bar{y}_{\alpha_V}(T, T_1) = \begin{cases} \frac{n_1}{nQ^{V,1}(T, T_1)} S_{\alpha_V} \exp(-\gamma_{\alpha_V}); & 0 \leq \alpha_V \leq i_*, \\ \frac{\Gamma}{\alpha_V + 1}; & i_* \leq \alpha_V \leq i_{**}, \\ \frac{n_3}{nQ^{V,3}(T)} S_{\alpha_V} \exp(-\varepsilon_{\alpha_V}); & i_{**} \leq \alpha_V \leq L, \end{cases} \quad (10.26)$$

$$\gamma_{\alpha_V} = \varepsilon_{\alpha_V} - \alpha_V \varepsilon_1 + \frac{T}{T_1} \alpha_V \varepsilon_1; \quad \varepsilon_{\alpha_V} = \frac{E_{\alpha_V}}{kT}; \quad \varepsilon_1 = \frac{E_1}{kT},$$

$$Q^{V,1}(T, T_1) = \sum_{\alpha_V} S_{\alpha_V} \exp(-\gamma_{\alpha_V}); \quad Q^{V,3}(T) = \sum_{\alpha_V} S_{\alpha_V} \exp(-\varepsilon_{\alpha_V}),$$

Величины n_1 , n_3 , Γ находятся из условий нормировки и непрерывности функции распределения.

Единая форма распределения (10.26) [7]

$$\begin{aligned}\bar{y}_{\alpha_V} &= \frac{\Psi_{\alpha_V}}{Q}, \\ \Psi_{\alpha_V} &= S_{\alpha_V} \exp \left[-\varepsilon_a - \varepsilon_b + b\varepsilon_1 \left(1 - \frac{T}{T_1} \right) + \ln \frac{i_* + 1}{c + 1} \right], \\ Q &= \sum_{\alpha_V} \Psi_{\alpha_V}; \quad \varepsilon_a = \frac{E_a}{kT}; \quad \varepsilon_b = \frac{E_b}{kT},\end{aligned}\quad (10.27)$$

где

$$\begin{aligned}a &= \begin{cases} i_{**} & \text{для интервала } 0 \leq \alpha_V < i_{**}, \\ \alpha_V & \text{для интервала } i_{**} \leq \alpha_V < L, \end{cases} \\ b &= \begin{cases} \alpha_V & \text{для интервала } 0 \leq \alpha_V < i_*, \\ i_* & \text{для интервала } i_* \leq \alpha_V < L, \end{cases} \\ c &= \begin{cases} i_* & \text{для интервала } 0 \leq \alpha_V < i_*, \\ \alpha_V & \text{для интервала } i_* \leq \alpha_V < i_{**}, \\ i_{**} & \text{для интервала } i_{**} \leq \alpha_V < L, \end{cases}\end{aligned}$$

где $0 < i_* < i_{**}$.

Обозначения

T_1 — температура первого колебательного уровня

ε_1 — безразмерная энергия первого колебательного уровня

a, b, c — параметры, зависящие от номера колебательного уровня

L — максимальный колебательный уровень ($\max \alpha_V$).

Переносные свойства

Вектор плотности полного теплового потока

$$\begin{aligned}\mathbf{q} &= -\lambda \nabla T - \sum_{\alpha} (E_{\alpha_R} + E_{\alpha_V}) n \mathcal{D} \nabla y_{\alpha} \equiv \\ &\equiv -[\lambda + n \mathcal{D} (c_V^R + c_V^T)] \nabla T - n \mathcal{D} c_V^{T_1} \nabla T_1.\end{aligned}\quad (10.28)$$

Комментарии

1. Вращательная теплоемкость c_V^R , колебательные теплоемкости c_V^T и $c_V^{T_1}$ определены формулами (10.21), (10.25) при условии, что индекс i опущен.

2. Распределение (10.26) получено впервые в работах Гордиеца [8].

3. При возрастании параметра T/T_1 (при $T/T_1 < 1$) значение i_* увеличивается и приближается к L , триноровское распределение становится справедливым на всех уровнях. Если пренебречь ангармоничностью, то распределение (10.27) переходит в неравновесное больцмановское

распределение с колебательной температурой $T_V = T_1$. При $T_1 = T$ реализуется равновесное больцмановское распределение.

4. Газодинамическими переменными являются n , \mathbf{v} , T , T_1 . Система уравнений для этих величин содержит уравнения сохранения массы, импульса и энергии и уравнение переноса колебательных квантов на нижних уровнях. Выражения для коэффициентов переноса и анализ точности приближенных формул даны в [9, 10].

5. Свойства неравновесных колебательных теплоемкостей подробно обсуждаются в [9].

6. Для гармонического осциллятора $c_V^T = 0$, $c_V^{T_1} = c_V^V(T_V)$, где $c_V^V(T_V)$ является теплоемкостью колебательных степеней свободы при постоянном объеме в зависимости от колебательной температуры.

7. При локальном термодинамическом равновесии $T = T_1$ и $c_V^T = c_V^V(T)$.

8. Учет ангармонических колебаний приводит к значениям неравновесной колебательной теплоемкости $c_V^{(T_1)}$, которая существенно отличается от значений равновесной теплоемкости $c_V^V(T_V)$, а также теплоемкости $c_V^V(T)$, полагаемых в приближении гармонических осцилляторов.

9. При $T_1 \gg T$ в азоте может иметь место отрицательный коэффициент теплопроводности [9–11].

10.3. Выражения для переносных свойств с учетом неупругих столкновений с вращательными обменами

10.3.1. Приближенные соотношения для заселенностей вращательных уровней

Назначение

Учет влияния вращения молекул на коэффициенты переноса.

Допущения

1. В левых частях систем уравнений (9.4) для возмущений $\varphi_{i\alpha}^{(I)}$, $\varphi_{i\alpha}^{(II)}$, определяющих динамическую вязкость и векторные переносные свойства соответственно, пренебрегается линеаризованными операторами неупругих столкновений, при которых возбуждаются колебательные и электронные степени свободы, однако учитываются операторы столкновений с возбуждением вращательных степеней свободы молекул (пример (2) в п. 9.1.5, когда $\alpha = \alpha_I \alpha_{II}$, $\alpha_I = \alpha_R$, $\alpha_{II} = \alpha_V \alpha_{эл}$).

2. Распределение по вращательным энергиям близко к больцмановскому, т. е. время вращательной релаксации порядка времени поступательной релаксации (см. допущения в п. 9.2.3).

3. Энергия возбужденных вращательных уровней молекул $E_{i\alpha_R}$ и сечения столкновений молекул с обменами поступательной

и вращательной энергией не зависят от их колебательного и электронного состояний, т. е. $\sigma_{i\alpha j\beta}^{i\gamma j\delta} = \sigma_{i\alpha_R j\beta_R}^{i\gamma_R j\delta_R}$.

Обозначения

$n_{i\alpha_R \alpha_{II}}$ — заселенность вращательного (α_R) и колебательно-электронного (α_{II}) состояния частиц компонента i

$n_{i\alpha_{II}}$ — заселенности колебательно-электронных состояний частиц компонента i , при этом $\alpha_{II} = \alpha_V \alpha_{эл}$

T — поступательно-вращательная температура

$\varphi_{i\alpha_R}^{(I)}$ — тензорная (по \mathbf{C}_i) часть возмущения функции распределения $\varphi_{i\alpha_R}$ для смеси газов, частицы которых обладают только поступательными и вращательными степенями свободы (формула (4.42) при замене индекса α на α_R)

$\varphi_{i\alpha_R}^{(II)}$ — векторная (по \mathbf{C}_i) часть возмущения функции распределения $\varphi_{i\alpha_R}$ (в d-представлении она дается формулой (4.57) при замене индекса α на α_R)

A^{rot} — величина, рассчитанная с учетом сечений неупругих столкновений с обменами вращательной энергии

A — величина, рассчитанная без учета этих сечений, т. е. по формулам для одноатомных частиц.

Определения

Функция распределения частиц компонента i в квантовом энергетическом состоянии с набором квантовых чисел $\alpha_R \alpha_{II}$ ($\alpha_{II} = \alpha_V \alpha_{эл}$) по собственным скоростям и вращательной энергии в нулевом приближении

$$f_{i\alpha_R \alpha_{II}}^{(0)} = y_{i\alpha_{II}} f_{i\alpha_R}^{(0)}.$$

Локальная функция распределения Максвелла–Больцмана частиц компонента i по собственным скоростям и вращательной энергии

$$f_{i\alpha_R}^{(0)} = n_i y_{i\alpha_R}^B(T) \left(\frac{m_i}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp(-W_i^2); \quad W_i^2 = \frac{m_i}{2kT} C_i^2. \quad (10.29)$$

Больцмановская функция распределения частиц компонента i по вращательной энергии

$$y_{i\alpha_R}^B = \frac{S_{i\alpha_R}}{Q_i^R} \exp(-\varepsilon_{i\alpha_R}). \quad (10.30)$$

Относительная заселенность колебательно-электронного состояния частиц сорта $i\alpha_{II}$

$$y_{i\alpha_{II}} = \frac{n_{i\alpha_{II}}}{n_i}; \quad \sum_{\alpha_{II}} y_{i\alpha_{II}} = 1; \quad n_{i\alpha_{II}} = \sum_{\alpha_R} n_{i\alpha_R \alpha_{II}}. \quad (10.31)$$

Безразмерная вращательная энергия частиц сорта $i\alpha_R$

$$\varepsilon_{i\alpha_R} = \frac{E_{i\alpha_R}}{kT}.$$

Комментарии

1. При использовании формул п. 9.1.5 учитывается, что здесь

$$Y_{i\alpha_R \alpha_{II}} = \frac{n_{i\alpha_R \alpha_{II}}}{n_i y_{i\alpha_R}^B} = y_{i\alpha_{II}},$$

поступательная температура T_t заменяется на вращательно-поступательную температуру T .

2. В отсутствие возбуждения электронных уровней система уравнений баланса имеет тот же вид, что и в разд. 9.2 для случая уровневой колебательной кинетики.

10.3.2. Переносные свойства, определенные по функции распределения в нулевом приближении

Функция распределения в нулевом приближении является локально равновесной функцией от собственных скоростей и вращательной энергии частиц:

$$f_{i\alpha_R \alpha_{II}}^{(0)} = y_{i\alpha_{II}} n_i \left(\frac{m_i}{2\pi kT} \right)^{3/2} \frac{S_{i\alpha_R}}{Q_i^R} \exp(-W_i^2 - \varepsilon_{i\alpha_R}). \quad (10.32)$$

Выражения для возмущений $\varphi_{i\alpha}^{(I)}$, $\varphi_{i\alpha}^{(II)}$

При сделанных допущениях (см. допущения в п. 9.1.5. и формулы (9.22))

$$\varphi_{i\alpha}^{(I)} = \varphi_{i\alpha_R}^{(I)}; \quad \varphi_{i\alpha}^{(II)} = \varphi_{i\alpha_R}^{(II)} - Q_{i\alpha_R} \mathbf{C}_i \cdot \nabla \ln y_{i\alpha_2}. \quad (10.33)$$

Возмущения $\varphi_{i\alpha_R}^{(I)}$, $\varphi_{i\alpha_R}^{(II)}$ заданы формулами (4.42), (4.57) при замене индекса α на α_R .

Система уравнений для функций $Q_{i\alpha_R}$

$$\sum_{\chi} \int f_{i\alpha_R}^{(0)} f_{j\beta_R}^{(0)} (Q'_{i\gamma_R} \mathbf{C}'_i - Q_{i\alpha_R} \mathbf{C}_i) g_{ij} \sigma_{i\alpha_R j\beta_R}^{i\gamma_R j\delta_R} d\Omega d\mathbf{C}_j = -f_{i\alpha_R}^{(0)} \mathbf{C}_i, \quad (10.34)$$

где

$$\chi = j\beta_R \gamma_R \delta_R; \quad Q'_{i\gamma_R} = Q(W_i'^2, \varepsilon_{i\gamma_R}); \quad Q_{i\alpha_R} = Q(W_i^2, \varepsilon_{i\alpha_R}).$$

Решение системы уравнений

Решение системы уравнений имеет вид ряда по полиномам Сонина и Вальдмана–Трубенбахера:

$$Q_{i\alpha_R} = \sum_{rm} q_i^{(rm)} S_{3/2}^{(r)}(W_i^2) P^{(m)}(\varepsilon_{i\alpha_R}). \quad (10.35)$$

Выражение для коэффициента $q_i^{(00)}$ при учете только первого члена ряда имеет вид

$$[q_i^{(00)}]_1 = \frac{m_i}{kT} \left(\sum_j \frac{x_j}{[\mathfrak{D}_{ij}^{\text{rot}}]_1} \right)^{-1}. \quad (10.36)$$

Комментарии

1. Величины $\varphi_{i\alpha_R}^{(\text{I})}$, $\varphi_{i\alpha}^{(\text{II})}$, $Q_{i\alpha_R}$ не зависят от набора квантовых чисел α_{II} и от сечений столкновений, приводящих к изменению колебательной и электронной энергий молекул и к химическим реакциям.

2. В дальнейшем рассматривается приближение (10.36), т. е. $Q_{i\alpha_R} = [q_i^{(00)}]_1$.

Переносные свойства и коэффициенты переноса

Коэффициент бинарной диффузии в молекулярном газе с учетом влияния вращений молекул

$$[\mathfrak{D}_{ij}^{\text{rot}}]_1 = \frac{2nm_i}{3kT} \left\{ \frac{1}{n_i n_j} \sum_{\nu} \int f_{i\alpha_R}^{(0)} f_{j\beta_R}^{(0)} \mathbf{W}_i \cdot (\mathbf{W}_i - \mathbf{W}'_i) d\sigma d\mathbf{C}_j \right\}^{-1}, \quad (10.37)$$

где $\nu = \alpha_R \beta_R \gamma_R \delta_R$, $d\sigma = g_{ij} \sigma_{i\alpha_R j\beta_R}^{i\gamma_R j\delta_R} d\Omega$.

Бездивергентный тензор напряжений

$$\boldsymbol{\pi} = \sum_{i\alpha_R} m_i \int f_{i\alpha_R}^{(0)} \varphi_{i\alpha_R}^{(\text{I})} \left(\mathbf{C}_i \mathbf{C}_i - \frac{1}{3} \delta C_i^2 \right) d\mathbf{C}_i = -2\eta^{\text{rot}} \mathbf{S}. \quad (10.38)$$

Вектор диффузионной скорости частиц компонента i

$$\mathbf{V}_i = \frac{1}{n_i} \sum_{\alpha_R} \int f_{i\alpha_R}^{(0)} \varphi_{i\alpha_R}^{(\text{II})} \mathbf{C}_i d\mathbf{C}_i = - \sum_j D_{ij}^{\text{rot}} \mathbf{d}_j - D_{Ti}^{\text{rot}} \nabla \ln T. \quad (10.39)$$

Вектор диффузионной скорости частиц сорта $i\alpha_{\text{II}}$

$$\mathbf{V}_{i\alpha_{\text{II}}} \equiv \frac{1}{n_i y_{i\alpha_{\text{II}}}} \sum_{\alpha_R} n_{i\alpha} \mathbf{V}_{i\alpha} = \mathbf{V}_i - \frac{1}{n_i y_{i\alpha_{\text{II}}}} \sigma_i^{\text{rot}} \nabla y_{i\alpha_{\text{II}}}. \quad (10.40)$$

Вектор плотности полного теплового потока

$$\mathbf{q} = \mathbf{h} + \sum_i n_i \mathbf{V}_i \left(\frac{5}{2} kT + E_i^R + E_i^{(\text{II})} + E_i^{\text{ch}} \right) - \sum_i \sigma_i^{\text{rot}} \nabla E_i^{(\text{II})}. \quad (10.41)$$

Вектор плотности приведенного теплового потока, обусловленного переносом поступательной и вращательной энергии частиц (d-представление)

$$\begin{aligned} \mathbf{h} &= \sum_{i\alpha_R} \int f_{i\alpha_R}^{(0)} \varphi_{i\alpha_R}^{(\text{II})} \mathbf{C}_i \left(W_i^2 - \frac{5}{2} + \varepsilon_{i\alpha_R} - \varepsilon_i^R \right) d\mathbf{C}_i = \\ &= -\lambda^{\text{rot}} \nabla T - p \sum_j D_{Tj}^{\text{rot}} \mathbf{d}_j. \end{aligned} \quad (10.42)$$

Вектор плотности приведенного теплового потока, обусловленного переносом поступательной и вращательной энергии частиц (V-представление)

$$\mathbf{h} = -\lambda^{\text{rot}} \nabla T + p \sum_i k_{Ti}^{\text{rot}} \mathbf{V}_i. \quad (10.43)$$

Коэффициент диффузии заселенностей частиц компонента i в колебательно-электронном квантовом состоянии $\alpha_{\text{II}} = \alpha_V \alpha_{\text{эл}}$

$$\sigma_i^{\text{rot}} = n_i \left(\sum_j \frac{x_j}{[\mathfrak{D}_{ij}^{\text{rot}}]_1} \right)^{-1}. \quad (10.44)$$

Комментарии

1. Формула (10.37) получена при использовании только первого члена разложения по полиномам Вальдмана–Трубенбахера.

2. При опускании индексов α_R , β_R и т.п. из (10.37) получается выражение для коэффициента бинарной диффузии атомарных газов $[\mathfrak{D}_{ij}]_1$.

3. Коэффициент вязкости, вектор диффузионной скорости \mathbf{V}_i , соотношение Стефана–Максвелла для \mathbf{d}_i и вектор приведенного теплового потока \mathbf{h} , обусловленного переносом поступательной и вращательной энергии частиц, даются формулами п.9.1.2 при замене индекса α на α_R .

4. При выводе выражения (10.44) использованы формулы (10.36), (10.37).

Вектор плотности полного теплового потока при неравновесных распределениях энергий уровней α_{II}

$$\mathbf{q} = -\lambda^{\text{rot}} \nabla T - n \mathfrak{D}^{\text{rot}} \nabla E^{(\text{II})}. \quad (10.45)$$

Вектор плотности полного теплового потока при равновесных распределениях энергий уровней α_{II}

$$\mathbf{q} = -\lambda^{\text{rot}} \nabla T - n \mathfrak{D}^{\text{rot}} (c_V^V + c_V^{\text{эл}}) \nabla T. \quad (10.46)$$

Обозначения

E_i^R — средняя энергия частиц компонента i во вращательном квантовом состоянии α_R

$$E_i^R = \sum_{\alpha_R} E_{i\alpha_R} y_{\alpha_R}^R(T).$$

$E_i^{(\text{II})}$ — средняя энергия частиц компонента i в колебательно-электронном квантовом состоянии $\alpha_{\text{II}} = \alpha_V \alpha_{\text{эл}}$

$$E_i^{(\text{II})} = \sum_{\alpha_{\text{II}}} y_{i\alpha_{\text{II}}} E_{i\alpha_{\text{II}}}.$$

Комментарии

1. Формулы для переносных свойств в частных случаях получаются путем замены относительных заселенностей $y_{i\alpha_{\text{II}}}$ электронно-

колебательных состояний частиц компонента i на квазистационарные выражения (см. разд. 9.2 и п. 10.2.4); в соответствии с использованными там методами переопределяется температура.

2. Выражения для коэффициента теплопроводности молекулярного газа λ^{rot} различной степени точности приведены в гл. 5.

3. При выводе формулы (10.46) из формулы (10.45) предполагается, что колебательные и электронные энергии молекул не зависят друг от друга. Здесь $c_V^V(T)$, $c_V^{\text{эл}}(T)$ — удельные теплоемкости при постоянном объеме колебательных и электронных степеней свободы соответственно.

4. Равновесие по энергиям уровней α_{II} достигается при высоких температурах, поэтому в формуле (10.46) коэффициент $\mathfrak{D}^{\text{rot}}$ полагается обычно равным коэффициенту самодиффузии одноатомного газа \mathfrak{D} [12].

5. При сильном возбуждении колебательных или электронных степеней свободы частиц необходим переход к более точной теории [3, 12, 13].

6. Теории коэффициентов переноса при слабом отклонении от равновесного распределения по вращательной энергии частиц посвящены работы [13, 14]. Для однокомпонентного газа получены достаточно точные расчетные формулы для коэффициента λ^{rot} , теоретические данные для коэффициентов переноса смеси молекулярных газов являются, в основном, формальными [12].

7. Сказанное в наибольшей степени относится к коэффициенту теплопроводности. Коэффициент динамической вязкости предполагается не зависящим от возбуждения вращательных уровней молекул. Поэтому коэффициент динамической вязкости смеси определяется по формулам, полученным для смеси атомарных газов.

Список литературы к главе 10

1. Kogan M. N., Galkin V. S., Makashev N. K. Generalized Chapman–Enskog method: derivation of the nonequilibrium gasdynamic equations // *Rar. Gas Dynam.* 11th Intern. Symp., Cannes, 1978. V. 2. Paris, 1979. P. 693–734.
2. Ферцигер Дж., Капер Г. Математическая теория процессов переноса в газах. — М.: Мир, 1976. — 554 с.
3. Мейзон Е. Перенос в нейтральном газе // *Кинетические процессы в газах и плазме* / Под ред. А. Хохштимы. — М.: Атомиздат, 1972. — С. 52–91.
4. Галкин В. С. О переносных свойствах неравновесных смесей многоатомных газов // *Изв. РАН. Механика жидк. и газов.* 1995. № 2. С. 183–189.
5. Ковалев В. Л. Гетерогенные каталитические процессы в аэротермодинамике. — М.: Физматлит, 2002. — 224 с.
6. Галкин В. С., Русаков С. В. О точности модифицированной поправки Эйкена к коэффициенту теплопроводности молекулярных газов // *Изв. РАН. Механика жидк. и газов.* 2005. № 4. С. 180–185.

7. Кустова Е.В. Кинетическая модель динамики молекулярного газа в сильно неравновесных условиях // Вестн. СПбГУ. Математика, Механика, Астрономия. 1995. Вып. 2. С. 60–65.
8. Гордиец Б.Ф., Мамедов Ш.С. Функция распределения и скорость релаксации колебательной энергии в системе ангармонических осцилляторов // ПМТФ. 1974. № 3. С. 13–22.
9. Kustova E. V., Nagnibeda E. A. Strong nonequilibrium effects on specific heats and thermal conductivity of diatomic gas // Chem. Physics. 1996. V. 208, No. 3. P. 313–329.
10. Кустова Е.В., Нагнибеда Е.А. Колебательная кинетика и процессы переноса в сильно неравновесном газе // Изв. РАН. Механика жидк. и газов. 1997. № 5. С. 150–160.
11. Добкин С.В., Сон Э.Е. Процессы переноса в колебательно-возбужденном молекулярном газе // ПМТФ. 1987. № 2. С. 10–17.
12. Mason E. A., Uribe F. J. The corresponding — states principle: dilute gases // Transport Properties of Fluids. Their Correlation, Prediction and Estimation. — Cambridge: Univ. Press, 1994. — P. 250–282.
13. Нагнибеда Е.А., Кустова Е.В. Кинетическая теория процессов переноса и релаксации в неравновесных потоках реагирующих газов. — СПб.: Изд-во СПбГУ, 2004. — 270 с.
14. Ern A., Giovangigli V. Multicomponent Transport Algorithms // Lect. Notes Phys. Series monographs. — N.Y.; Berlin; Heidelberg: Springer Verlag, 1994. — 427 p.

Глава 11

ПРОЦЕССЫ ПЕРЕНОСА В ПЛАЗМЕ

Плазма — это смесь частично или полностью ионизованных газов, образованная из произвольного числа компонентов, включающих заряженные и нейтральные частицы, и электрически нейтральная в каждом физически малом объеме (квазинейтральная плазма).

Кинетическое описание процессов переноса в ионизованном газе (плазме) основывается на использовании кинетического уравнения с интегралом столкновений в форме Больцмана либо Ландау [1–5]. При выводе интеграла столкновений Ландау используется концепция экранирования кулоновского поля зарядов, позволяющая устранить расходимость некоторых интегральных выражений (эффективных сечений столкновений), которая связана с дальнодействующим характером кулоновских взаимодействий. Аналогичная проблема возникает и при использовании для расчета коэффициентов переноса в плазме обычного кинетического уравнения Больцмана. При этом расходимость выражений для эффективных сечений столкновений может быть устранена использованием экранированного кулоновского потенциала или с помощью формального обрезания параметра столкновений (прицельного расстояния) на длине порядка радиуса Дебая. Если исключить из рассмотрения случай сильно неравновесной неизотермической плазмы [3], то результаты, получаемые при том и другом подходе, практически не отличаются друг от друга. Поэтому при описании свойств переноса и при получении выражений для коэффициентов переноса в плазме в основу положено кинетическое уравнение с больцмановским интегралом столкновений и следующие из него общие уравнения переноса, которые рассматривались в гл. 3. При описании кинетических явлений в ионизованном газе используются многотемпературные и многожидкостные модели, основанные на записи уравнений переноса для каждого из компонентов плазмы [4–6].

11.1. Одножидкостная модель плазмы

Назначение модели

Получение уравнений баланса (уравнений сохранения массы, заряда, импульса и энергии) в одножидкостном приближении. Одножидкостная модель плазмы соответствует представлению среды как единой жидкости с одной температурой T и среднемассовой скоростью \mathbf{v} .

Допущения

1. Предполагается, что плазма представляет собой смесь электронов, ионов и нейтральных частиц.

2. Одножидкостная модель плазмы соответствует представлению среды как единой жидкости со среднemasсовой скоростью \mathbf{v} .

3. Возбуждение внутренних степеней свободы тяжелых частиц и химические реакции не учитываются.

4. Макроскопические параметры плазмы определяются с помощью функции распределения.

Уравнения сохранения для одножидкостной модели плазмы

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot \rho \mathbf{v}; \quad \frac{\partial \rho_e}{\partial t} = -\nabla \cdot \rho_e \mathbf{v} - \nabla \cdot \mathbf{j}, \quad (11.1)$$

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\nabla p - \nabla \pi + \rho_e \mathbf{E}' + [\mathbf{j} \times \mathbf{B}] + \rho \mathbf{g}, \quad (11.2)$$

$$\frac{3}{2} \frac{dp}{dt} = -\frac{5}{2} p \nabla \mathbf{v} - \pi : \nabla \mathbf{v} - \nabla \mathbf{q} + \mathbf{j} \mathbf{E}'; \quad \mathbf{E}' = \mathbf{E} + [\mathbf{v} \times \mathbf{B}]. \quad (11.3)$$

Обозначения

\mathbf{E} — напряженность электрического поля

\mathbf{B} — магнитная индукция

\mathbf{g} — ускорение силы тяжести

$Z_i = e_i/e$ — кратность заряда частицы (для электронов $Z_i = -1$)

Определения

Плотность тока проводимости

$$\mathbf{j} = \sum_i n_i e_i \mathbf{V}_i = e \sum_i \frac{Z_i}{m_i} \mathbf{J}_i. \quad (11.4)$$

Плотность объемного заряда плазмы

$$\rho_e = \sum_i n_i e_i = e \sum_i n_i Z_i. \quad (11.5)$$

Комментарии

1. Основные макроскопические параметры плазмы определены через функцию распределения $f_i(\mathbf{c}_i, \mathbf{r}, t)$ с помощью выражений, аналогичных определениям (3.8) для многокомпонентной газовой смеси.

2. Как и для смеси нейтральных газов, уравнения сохранения (11.1)–(11.3) для плазмы следуют из общего уравнения переноса (3.13). При этом сила, действующая на заряженные частицы (отнесенная к массе частицы), определена выражением

$$\mathbf{F}_i = \frac{e Z_i}{m_i} (\mathbf{E} + [\mathbf{v}_i \times \mathbf{B}]) + \mathbf{X}_i. \quad (11.6)$$

3. В уравнениях (11.2), (11.3) в качестве сил неэлектромагнитной природы рассматривается только сила тяжести ($\mathbf{X}_i = \mathbf{g}$).

4. Для квазинейтральной плазмы $\rho_e = 0$.
 5. Система уравнений (11.1)–(11.3) соответствует уравнениям баланса (1.40)–(1.44). Для смеси идеальных газов

$$p = \frac{2}{3} u = nkT. \quad (11.7)$$

6. Уравнения (11.2), (11.3), (11.6) становятся замкнутыми после того, как в них подставляются выражения для плотности тока \mathbf{j} , тензора вязких напряжений $\boldsymbol{\pi}$ и вектора плотности теплового потока \mathbf{q} . Структура этих выражений устанавливается методами неравновесной термодинамики (гл. 2) или методами кинетической теории. Явные выражения для кинетических коэффициентов находятся с помощью различных методов решения кинетического уравнения (гл. 5).

11.2. Многотемпературная одножидкостная модель плазмы

В реальной плазме из-за слабого обмена энергией при столкновениях электронов с тяжелыми частицами образуются состояния, характеризующиеся различными температурами электронов и тяжелых частиц. Для описания такой плазмы вводится в рассмотрение многотемпературная модель плазмы, в которой каждая из подсистем (компонентов плазмы) имеет собственную температуру. Вместе с тем, как и в одножидкостной модели, в качестве переменной, от которой зависит функция распределения частиц, используется переменная $\mathbf{C}_i = \mathbf{c}_i - \mathbf{v}$ или собственная скорость частицы, сдвинутая относительно среднемассовой скорости смеси. Такая плазма называется неизотермической [4–7].

Назначение модели

Получение системы уравнений баланса для компонентов неизотермической плазмы с учетом обмена импульсом и энергией между компонентами в результате столкновений частиц разных сортов.

Допущения

См. разд. 11.1.

Уравнения сохранения для многотемпературной одножидкостной модели плазмы

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} = -\nabla \rho_i \mathbf{v}_i, \quad (11.8)$$

$$\rho_i \frac{d_i \mathbf{v}_i}{dt} = -\nabla p_i - \nabla \pi_i - \nabla \rho_i \mathbf{V}_i \mathbf{V}_i + \rho_i \mathbf{F}_i + \mathbf{R}_i, \quad (11.9)$$

$$\begin{aligned} \frac{3}{2} n_i k \frac{dT_i}{dt} = & -n_i k T_i \nabla \cdot \mathbf{v}_i - \pi_i : \nabla \mathbf{v}_i - \nabla \cdot \mathbf{q}_i + \\ & + \frac{3}{2} k T_i \nabla \cdot n_i \mathbf{V}_i + \rho_i \mathbf{V}_i \left(\mathbf{F}_i - \frac{d\mathbf{v}}{dt} \right) + Q_i. \end{aligned} \quad (11.10)$$

Определения

Массовая плотность компонента i

$$\rho_i = m_i \int f_i d\mathbf{c}_i. \quad (11.11a)$$

Макроскопическая скорость частиц компонента i

$$\mathbf{v}_i = n_i^{-1} \int \mathbf{c}_i f_i d\mathbf{c}_i. \quad (11.11б)$$

Вектор диффузионной скорости

$$\mathbf{V}_i = n_i^{-1} \int (\mathbf{c}_i - \mathbf{v}) f_i d\mathbf{c}_i. \quad (11.11в)$$

Вектор плотности массового диффузионного потока компонента i

$$\mathbf{J}_i = m_i n_i \mathbf{V}_i. \quad (11.11г)$$

Температура

$$\frac{3}{2} n_i k T_i = \frac{m_i}{2} \int (\mathbf{c}_i - \mathbf{v})^2 f_i d\mathbf{c}_i, \quad p_i = n_i k T_i. \quad (11.11д)$$

Парциальный тензор вязких напряжений

$$\pi_{irs} = m_i \int \left[(\mathbf{c}_i - \mathbf{v})_r (\mathbf{c}_i - \mathbf{v})_s - \frac{1}{3} \delta_{rs} (\mathbf{c}_i - \mathbf{v})^2 \right] f_i d\mathbf{c}_i. \quad (11.11e)$$

Вектор плотности теплового потока, обусловленный переносом кинетической энергии поступательного движения

$$\mathbf{q}_i = \frac{m_i}{2} \int (\mathbf{c}_i - \mathbf{v}) (\mathbf{c}_i - \mathbf{v})^2 f_i d\mathbf{c}_i. \quad (11.11ж)$$

Среднее значение импульса, передаваемого при столкновениях частиц компонента i с частицами остальных компонентов смеси

$$\mathbf{R}_i = \sum_{j=1}^{N-1} \int m_i (\mathbf{c}'_i - \mathbf{c}_i) f_i f_j \sigma_{ij}(g_{ij}, \chi) d\Omega d\mathbf{c}_i d\mathbf{c}_j, \quad (11.12)$$

Среднее значение энергии, передаваемой при столкновениях частиц компонента i с частицами остальных компонентов смеси

$$Q_i = \sum_{j=1}^{N-1} \int \frac{m_i}{2} [(\mathbf{c}'_i - \mathbf{v})^2 - (\mathbf{c}_i - \mathbf{v})^2] f_i f_j \sigma_{ij}(g_{ij}, \chi) d\Omega d\mathbf{c}_i d\mathbf{c}_j. \quad (11.13)$$

Комментарии

1. Использовано сокращение $\frac{d_i}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}_{ir} \frac{\partial}{\partial x_r}$.

2. Из законов сохранения импульса и энергии при упругом парном столкновении частиц следует

$$\sum_{i=1}^N \mathbf{R}_i = 0; \quad \sum_{i=1}^N Q_i = 0. \quad (11.14)$$

3. Суммирование уравнений (11.8)–(11.10) по компонентам частиц i с учетом условия $\sum_{i=1}^N \mathbf{J}_i = 0$ приводит к уравнениям одножидкостной модели плазмы (11.1)–(11.3), где

$$p = \sum_{i=1}^N p_i \quad \text{или} \quad nT = \sum_{i=1}^N n_i T_i.$$

11.3. Многожидкостная модель плазмы

В многожидкостной модели каждый компонент плазмы характеризуется собственной температурой и собственной макроскопической скоростью [3, 6]. В отличие от одножидкостной модели плазмы, где в качестве переменной, от которой зависит функция распределения частиц, используется переменная $\mathbf{C}_i = \mathbf{c}_i - \mathbf{v}$, в рассматриваемой модели применяется переменная $\mathbf{C}_i^\Delta = \mathbf{c}_i - \mathbf{v}_i$ или скорость частицы плазмы, сдвинутая относительно макроскопической скорости компонента \mathbf{v}_i .

Назначение модели

Получение уравнений переноса для компонентов плазмы в многожидкостном приближении.

Уравнения сохранения для многожидкостной модели плазмы

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} = -\nabla \rho_i \mathbf{v}_i, \quad (11.15)$$

$$\rho_i \frac{d_i \mathbf{v}_i}{dt} = -\nabla p_i^\Delta - \nabla \pi_i^\Delta + n_i Z_i e (\mathbf{E} + [\mathbf{v}_i \times \mathbf{B}]) + n_i \mathbf{X}_i + \mathbf{R}_i^\Delta, \quad (11.16)$$

$$\frac{3}{2} n_i k \frac{dT_i^\Delta}{dt} = -p_i^\Delta \nabla \cdot \mathbf{v}_i - \nabla \mathbf{q}_i^\Delta - \pi_{irs}^\Delta \frac{\partial \mathbf{v}_{ir}}{\partial x_s} + Q_i^\Delta. \quad (11.17)$$

Обозначения

\mathbf{C}_i^Δ — скорость частицы плазмы, сдвинутая относительно макроскопической скорости компонента (жидкости) i

T_i^Δ — температура компонента i , вычисленная по скорости \mathbf{C}_i^Δ

p_i^Δ — давление компонента i , вычисленное по скорости \mathbf{C}_i^Δ

π_{irs}^Δ — компонента тензора напряжений компонента i , вычисленная по скорости \mathbf{C}_i^Δ

$(\mathbf{q}_i^\Delta)_r$ — проекция вектора плотности теплового потока компонента i , вычисленного по скорости \mathbf{C}_i^Δ

\mathbf{R}_i^Δ — средняя величина импульса, передаваемая при столкновениях частиц компонента i с частицами других компонентов, вычисленная по скорости \mathbf{C}_i^Δ

Q_i^Δ — средняя величина энергии, передаваемая при столкновениях частиц компонента i с частицами других компонентов, вычисленная по скорости \mathbf{C}_i^Δ .

О п р е д е л е н и я

Температура компонента i , вычисленная по скорости \mathbf{C}_i^Δ

$$\frac{3}{2} n_i k T_i^\Delta = \frac{m_i}{2} \int (\mathbf{c}_i - \mathbf{v}_i)^2 f_i d\mathbf{c}_i, \quad (11.18a)$$

Давление компонента i , вычисленное по скорости \mathbf{C}_i^Δ

$$p_i^\Delta = n_i k T_i^\Delta, \quad (11.18б)$$

Компонента тензора напряжений, вычисленная по скорости \mathbf{C}_i^Δ

$$\pi_{irs}^\Delta = m_i \int \left[(\mathbf{c}_i - \mathbf{v}_i)_r (\mathbf{c}_i - \mathbf{v}_i)_s - \frac{1}{3} \delta_{rs} (\mathbf{c}_i - \mathbf{v}_i)^2 \right] f_i d\mathbf{c}_i, \quad (11.18в)$$

Вектор плотности теплового потока, вычисленный по скорости \mathbf{C}_i^Δ

$$\mathbf{q}_i^\Delta = \frac{m_i}{2} \int (\mathbf{c}_i - \mathbf{v}_i) (\mathbf{c}_i - \mathbf{v}_i)^2 f_i d\mathbf{c}_i. \quad (11.18г)$$

К о м м е н т а р и и

1. Параметры компонентов плазмы, полученные с использованием многотемпературной одножидкостной и многожидкостной моделей, связаны следующими соотношениями:

$$\begin{aligned} k T_i^\Delta &= k T_i - \frac{1}{3} m \mathbf{V}_i^2; \quad \pi_{irs}^\Delta = \pi_{irs} - \rho_i \left(\mathbf{V}_{ir} \mathbf{V}_{is} - \frac{1}{3} \delta_{rs} \mathbf{V}_i^2 \right), \\ (\mathbf{q}_i^\Delta)_r &= (\mathbf{q}_i)_r - \frac{5}{2} p_i \mathbf{V}_{ir} - \pi_{irs} \mathbf{V}_{is} - \rho_i \mathbf{V}_{ir} \mathbf{V}_i^2, \\ \mathbf{R}_i^\Delta &= \mathbf{R}_i, \quad Q_i^\Delta = Q_i - \mathbf{V}_i \cdot \mathbf{R}_i. \end{aligned} \quad (11.19)$$

2. Использовано сокращение

$$\frac{d_i}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}_{ir} \frac{\partial}{\partial x_r}.$$

3. Уравнения многожидкостной и многотемпературной одножидкостной модели плазмы приводят к идентичным результатам при условии, что диффузионные скорости частиц плазмы малы по сравнению со средней тепловой скоростью частиц $(|\mathbf{V}_i| \ll (k T_i / m_i)^{1/2})$. Это позво-

ляет пренебрегать квадратичными относительно переменных \mathbf{V}_i и π_{irs} членами.

11.4. Уравнения переноса в квазигидродинамическом приближении

Квазигидродинамическое приближение позволяет выявить многие особенности макроскопического поведения плазмы. Оно используется для вывода обобщенного закона Ома, для анализа диффузии заряженных частиц поперек сильного магнитного поля. Квазигидродинамическое приближение основано на перечисленных ниже допущениях.

Назначение модели

Вычисление средней передачи импульса и энергии при столкновениях и получение уравнений переноса в квазигидродинамическом приближении.

Допущения

1. Используется максвелловская функция распределения с собственной температурой для каждого из компонентов смеси, как функция скорости, сдвинутой относительно макроскопической скорости компонента:

$$f_i = n_i \left(\frac{m_i}{2\pi k T_i} \right)^{3/2} \exp \left[-\frac{m_i}{2k T_i} (\mathbf{c}_i - \mathbf{v}_i)^2 \right]. \quad (11.20)$$

2. Диффузионная скорость $\mathbf{V}_i = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}$ предполагается малой по сравнению со средней тепловой скоростью частиц плазмы:

$$|\mathbf{V}_i| \ll \left(\frac{k T_i}{m_i} \right)^{1/2}. \quad (11.21)$$

С учетом условия (11.21) выражение для f_i (11.20) приближенно записывается в виде

$$f_i = n_i \left(\frac{m_i}{2\pi k T_i} \right)^{3/2} \left(1 + \frac{m_i}{k T_i} \mathbf{V}_i \cdot \mathbf{c}_i \right) \exp \left[-\frac{m_i}{2k T_i} (\mathbf{c}_i - \mathbf{v})^2 \right]. \quad (11.22)$$

3. В квазигидродинамическом приближении для замыкания уравнений переноса не используются соотношения Стефана–Максвелла.

11.4.1. Средние значения передаваемых импульса и энергии

Выражения для средних значений импульса и энергии, передаваемых при столкновениях частиц компонента i с частицами остальных компонентов смеси

$$\mathbf{R}_i = - \sum_{j=1}^N ' n_i \mu_{ij} \nu_{ij} (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j), \quad (11.23)$$

$$Q_i = - \sum_{j=1}^N \frac{3kn_i \nu_{ij} \mu_{ij}}{m_i + m_j} (T_i - T_j). \quad (11.24)$$

Обозначение

ν_{ij} — эффективная частота столкновений частиц компонентов i и j

Комментарий

Выражения (11.23) и (11.24) следуют из (11.12) и (11.13) после подстановки в них выражений (11.22) для f_i и f_j и использования соотношений между скоростями частиц до и после столкновения. После перехода к переменным в системе центра масс частиц совершается интегрирование по переменной — скорости центра масс.

Выражения для ν_{ij} в различных случаях

Связь эффективной частоты столкновений с коэффициентом взаимной диффузии частиц компонентов i и j при $T_i = T_j = T$

$$\nu_{ij} = \frac{n_j kT}{\mu_{ij} n[\mathfrak{D}_{ij}]_1}. \quad (11.25)$$

Эффективная частота упругих столкновений электрона с нейтральной частицей (атомом или молекулой)

$$\begin{aligned} \nu_{\text{эфф}} = \tau_{\text{ен}}^{-1} &= \frac{1}{3} \left(\frac{2}{\pi} \right)^{1/2} \left(\frac{m_e}{kT_e} \right)^{5/2} \int_0^\infty \nu_{\text{ен}}(c) c^4 \exp \left(-\frac{m_e c^2}{2kT_e} \right) dc, \\ \nu_{\text{ен}}(c) &= n_n c \int_{\Omega} \sigma_{\text{ен}}(c, \chi) (1 - \cos \chi) d\Omega. \end{aligned} \quad (11.26)$$

Эффективная частота кулоновских столкновений заряженных частиц

$$\nu_{ij} = \tau_{ij}^{-1} = \frac{16\sqrt{\pi}}{3} n_j \left(\frac{m_i m_j}{2(m_i kT_j + m_j kT_i)} \right)^{3/2} \left(\frac{Z_i Z_j e^2}{4\pi\epsilon_0 \mu_{ij}} \right)^2 \ln \Lambda_{ij}, \quad (11.27)$$

Обозначение

$[\mathfrak{D}_{ij}]_1$ — коэффициент диффузии бинарной смеси частиц компонентов i и j , рассчитанный в первом приближении Чепмена–Каулинга (см. формулу (5.67))

Определения

Эффективная частота столкновений частиц компонентов i и j

$$\nu_{ij} = \frac{4}{3} n_j \langle v_{ij} \rangle \overline{Q_{ij}^{(1,1)}}. \quad (11.28)$$

Средняя относительная скорость частиц

$$\langle v_{ij} \rangle = \left(\frac{8(m_i kT_j + m_j kT_i)}{\pi m_i m_j} \right)^{1/2}. \quad (11.29)$$

Усредненное транспортное сечение столкновений (интеграл столкновений)

$$\overline{Q_{ij}^{(1,1)}} = \int_0^\infty \zeta^5 \exp(-\zeta^2) Q_{ij}^{(1)}(g_{ij}) d\zeta, \quad (11.30)$$

$$\zeta = \left(\frac{m_i m_j}{2(m_i kT_j + m_j kT_i)} \right)^{1/2} g_{ij}, \quad g_{ij} = |\mathbf{c}_i - \mathbf{c}_j|.$$

Транспортное сечение столкновений

$$Q_{ij}^{(1)}(g_{ij}) = 2\pi \int_0^\pi \sigma_{ij}(g_{ij}, \chi) (1 - \cos \chi) \sin \chi d\chi. \quad (11.31)$$

Кулоновский логарифм $\ln \Lambda_{ij}$

$$\Lambda_{ij} = 12\pi \frac{\varepsilon_0}{|Z_i Z_j e^2|} \frac{\mu_{ij} (m_i kT_j + m_j kT_i)}{m_i m_j} R_D. \quad (11.32a)$$

Радиус Дебая R_D

$$\frac{1}{R_D^2} = \sum_i \frac{n_i Z_i^2 e^2}{\varepsilon_0 kT_i}. \quad (11.32б)$$

Комментарий

Конкретный вид выражения для эффективной частоты столкновений $\nu_{эфф}$ для некоторых моделей взаимодействий электрон-нейтральная частица, так же как выражения для эффективной частоты электрон-ионных, электрон-электронных и ион-ионных столкновений заряженных частиц, рассматриваются в гл. 6.

11.4.2. Уравнения сохранения для компонентов плазмы в квази-гидродинамическом приближении

Уравнения сохранения

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} = -\nabla \rho_i \mathbf{v}_i, \quad (11.33)$$

$$\rho_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} + \nabla p_i - n_i Z_i e (\mathbf{E} + [\mathbf{v}_i \times \mathbf{B}]) + \rho_i \mathbf{X}_i = - \sum_j n_i \mu_{ij} \nu_{ij} (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j), \quad (11.34)$$

$$\frac{3}{2} n_i k \frac{dT_i}{dt} + p_i \nabla \cdot \mathbf{v}_i + \frac{5}{2} \nabla p_i \mathbf{V}_i + \mathbf{V}_i \mathbf{R}_i = - \sum_j \frac{3kn_i \mu_{ij} \nu_{ij}}{m_i + m_j} (T_i - T_j). \quad (11.35)$$

Комментарии

1. В принятом приближении $\pi_i = 0$ и $\mathbf{q}_i = (5/2)p_i\mathbf{V}_i$.
2. Уравнение сохранения энергии (11.35) записывается при выполнении приближенного условия $d\mathbf{v}/dt \approx d_i\mathbf{v}_i/dt$, где $d_i\mathbf{v}_i/dt$ заменяется с применением (11.34).

11.4.3. Обобщенный закон Ома в квазигидродинамическом приближении

Назначение модели

Получение выражения для плотности тока проводимости \mathbf{j} для частично ионизованной плазмы, состоящей из электронов, ионов и нейтральных атомов одного компонента.

Система уравнений в квазигидродинамическом приближении

$$\sum_j n_i \mu_{ij} \nu_{ij} (\mathbf{V}_i - \mathbf{V}_j) = n_i Z_i e (\mathbf{E} + [\mathbf{V}_i \times \mathbf{B}]) - \left(\nabla p_i - \frac{\rho_i}{\rho} \nabla p \right). \quad (11.36)$$

Для плазмы, образованной из электронов, а также ионов и атомов одного компонента, уравнения (11.36) записываются для электронного и нейтрального компонента, поскольку только два из трех уравнений оказываются независимыми. Тогда обобщенный закон Ома записывается в виде

$$\sigma_0 \mathbf{E}^* = \mathbf{j} + \beta_e [\mathbf{j} \times \mathbf{e}_B] + s [\mathbf{e}_B \times [\mathbf{j} \times \mathbf{e}_B]]; \quad \mathbf{e}_B = \frac{\mathbf{B}}{|\mathbf{B}|}. \quad (11.37)$$

Это уравнение разрешается относительно плотности тока проводимости \mathbf{j} :

$$\mathbf{j} = \sigma_{\parallel} \mathbf{E}_{\parallel}^* + \sigma_{\perp} \mathbf{E}_{\perp}^* + \sigma_H [\mathbf{e}_B \times \mathbf{E}^*], \quad (11.38)$$

Обозначения

\mathbf{E}_{\parallel}^* и \mathbf{E}_{\perp}^* — параллельная и перпендикулярная вектору индукции магнитного поля компоненты напряженности эффективного электрического поля

\mathbf{E}^* — напряженность эффективного электрического поля

n_e — концентрация электронов

p_e — давление электронов

$\alpha = n_{\text{ion}} / (n_{\text{ion}} + n_n)$ — степень ионизации плазмы

$\nu_{\text{ion}, n}$ — частота упругих столкновений ионов с нейтральными частицами

\mathbf{e}_B — единичный вектор в направлении вектора индукции магнитного поля

σ_{\parallel} , σ_{\perp} — продольная и поперечная электропроводность плазмы

σ_H — холловская электропроводность плазмы

s — коэффициент проскальзывания ионов относительно нейтральных частиц

β — параметр Холла для электронов и ионов

ω_e — циклотронная частота электронов и ионов.

Определения

Плотность тока проводимости

$$\mathbf{j} = \sum_k n_k Z_k e \mathbf{V}_k \quad (k = e, \text{ion}). \quad (11.39)$$

Напряженность эффективного электрического поля

$$\mathbf{E}^* = \mathbf{E}' + \frac{1}{n_e e} \nabla p_e, \quad \mathbf{E}' = \mathbf{E} + [\mathbf{v} \times \mathbf{B}]. \quad (11.40)$$

Продольная электропроводность плазмы

$$\sigma_{\parallel} = \sigma_0 = \frac{n_e e^2}{m_e} \tau_0, \quad \tau_0^{-1} = \tau_{e, \text{ion}}^{-1} + \tau_{\text{en}}^{-1}. \quad (11.41)$$

Поперечная электропроводность плазмы

$$\sigma_{\perp} = \sigma_0 \frac{1 + s}{(1 + s)^2 + \beta_e^2}. \quad (11.42)$$

Холловская электропроводность плазмы

$$\sigma_H = \sigma_0 \frac{\beta_e}{(1 + s)^2 + \beta_e^2}. \quad (11.43)$$

Коэффициент проскальзывания ионов относительно нейтральных частиц

$$s = (1 - \alpha)^2 \beta_e \beta_{\text{ion}}. \quad (11.44)$$

Параметры Холла для электронов и ионов

$$\beta_e = \omega_e \tau_0; \quad \beta_{\text{ion}, n} = \omega_{\text{ion}, n} \tau_{\text{ion}, n}; \quad \tau_{\text{ion}, n} = \nu_{\text{ion}, n}^{-1}. \quad (11.45)$$

Циклотронная частота электронов и ионов

$$\omega_e = \frac{e}{m_e} |\mathbf{B}|, \quad \omega_i = \frac{Ze}{\mu_{\text{ion}, n}} |\mathbf{B}|. \quad (11.46)$$

Комментарий

Обобщенный закон Ома связывает плотность тока проводимости в плазме \mathbf{j} с напряженностью эффективного электрического поля \mathbf{E}^* и индукцией магнитного поля \mathbf{B} . При его выводе используется уравнение движения для отдельного компонента плазмы (11.9), в котором производная $d_i \mathbf{v}_i / dt$ исключается с помощью уравнения движения для плазмы в целом (11.2) в предположении, что $d_i \mathbf{v}_i / dt \approx d\mathbf{v} / dt$.

11.5. Уравнения переноса в плазме в приближении 13 моментов метода Грэда

Назначение модели

Получение замкнутой системы уравнений переноса для неизотермической плазмы при наличии электрического и магнитного полей в приближении 13 моментов метода Грэда [4, 5, 8, 9].

Допущения

1. В качестве функции распределения нулевого приближения (весовой функции) выбирается максвелловское распределение с собственной температурой для каждого из компонентов смеси, как функция скорости, сдвинутой относительно среднемассовой скорости \mathbf{v} :

$$f_i^{(0)} = n_i \left(\frac{m_i}{2\pi k T_i} \right)^{3/2} \exp \left(- \frac{m_i \mathbf{C}_i^2}{2k T_i} \right); \quad \mathbf{C}_i = \mathbf{c}_i - \mathbf{v}.$$

2. В разложении функции распределения по неприводимым полиномам Эрмита оставлены лишь те члены, коэффициенты которых (моменты функции распределения) выражаются через макроскопические параметры компонентов смеси: диффузионную скорость \mathbf{V}_i , тензор вязких напряжений π_{irs} и вектор плотности теплового потока \mathbf{q}_i .

3. Уравнения переноса записываются в приближении, соответствующем использованию линеаризованного уравнения Больцмана.

4. Выражения для правых частей уравнений переноса получаются при использовании следующего разложения функции распределения:

$$f_i = f_i^{(0)}(1 + \phi_i), \quad (11.47)$$

$$\begin{aligned} \phi_i = & \frac{m_i}{k T_i} \mathbf{V}_i \mathbf{C}_i + \frac{m_i}{2k T_i} \frac{\pi_{irs}}{p_i} \left(\mathbf{C}_{ir} \mathbf{C}_{is} - \frac{1}{3} \delta_{rs} \mathbf{C}_i^2 \right) + \\ & + \frac{m_i}{5k T_i} \frac{1}{p_i} \left(\mathbf{q}_i - \frac{5}{2} p_i \mathbf{V}_i \right) \left(\frac{m_i \mathbf{C}_i^2}{k T_i} - 5 \right) \mathbf{C}_i; \quad p_i = n_i k T_i. \end{aligned} \quad (11.48)$$

Газодинамические переменные: n_i , \mathbf{V}_i , T_i , π_{irs} , \mathbf{q}_i .

Газодинамические переменные определены выражениями (11.11).

Уравнения переноса

Полная замкнутая система уравнений переноса неизотермической плазмы состоит из уравнений сохранения (11.8), (11.10) (уравнений для параметров $\rho_i = m_i n_i$ и T_i) и уравнений для \mathbf{V}_i , π_i и $\mathbf{h}_i = \mathbf{q}_i - (5/2)p_i \mathbf{V}_i$:

$$\frac{d\rho_i \mathbf{V}_i}{dt} + p \mathbf{d}_i + \nabla \pi_i - \rho_i [\mathbf{V}_i \times \boldsymbol{\omega}_i] - \frac{\rho_i}{\rho} [\mathbf{j} \times \mathbf{B}] = \mathbf{R}_i^{(1)}, \quad (11.49)$$

$$\frac{d\pi_{irs}}{dt} + 2p_i \varepsilon_{rs} + \frac{4}{5} \left\{ \frac{\partial \mathbf{q}_{ir}}{\partial x_s} \right\} - 2 \left\{ [\pi_i \times \boldsymbol{\omega}_i]_{rs} \right\} = \mathbf{R}_{irs}^{(2)}, \quad (11.50)$$

$$\frac{d\mathbf{h}_i}{dt} + \frac{5}{2} \frac{k}{m_i} p_i \nabla T_i + \frac{k T_i}{m_i} \nabla \pi_i - [\mathbf{h}_i \times \boldsymbol{\omega}_i] = \mathbf{R}_i^{(3)}. \quad (11.51)$$

В уравнениях (11.49)–(11.51) используются сокращенные обозначения

$$\begin{aligned} \{A_r B_s\} &= \frac{1}{2}(A_r B_s + B_r A_s) - \frac{1}{3} A_\ell B_\ell \delta_{rs}, \quad \varepsilon_{rs} = \left\{ \frac{\partial u_r}{\partial x_s} \right\}, \\ [\pi_i \times \omega_i]_{rs} &= \pi_{i\ell r} \mathbf{e}_{s\ell m} \omega_{im}; \quad \omega_i = \left(\frac{e_i B}{m_i} \right) \mathbf{e}_B, \\ (\nabla \pi_i)_r &= \partial \pi_{irs} / \partial x_s. \end{aligned} \quad (11.52)$$

Здесь \mathbf{e}_{slm} — единичный антисимметричный тензор третьего ранга (перестановочный тензор).

Комментарии

1. Система уравнений переноса (уравнений моментов) получается в результате умножения линеаризованного кинетического уравнения Больцмана, записанного для компонента смеси, на соответствующие неприводимые полиномы Эрмита, по которым производится разложение поправки к функции распределения ϕ_i , с последующим интегрированием по скоростям частиц [4, 5].

2. Уравнение (11.49) следует из (11.9), если исключить $d\mathbf{v}/dt$ с помощью уравнения движения для плазмы в целом (11.2). При этом диффузионная термодинамическая сила \mathbf{d}_i , при выполнении условия квазинейтральности, определена выражением

$$\mathbf{d}_i = \nabla \left(\frac{n_i}{n} \right) + \left(\frac{n_i}{n} - \frac{\rho_i}{\rho} \right) \nabla \ln p - \frac{1}{p} n_i \mathbf{e}_i \mathbf{E}'. \quad (11.53)$$

Правые части уравнений переноса при $T_i = T$

$$\mathbf{R}_i^{(1)} = -\frac{5}{2} \left[\frac{5}{2} \sum_j \Lambda_{ij}^{00} \mathbf{V}_j - \sum_j \Lambda_{ij}^{01} \frac{\mathbf{h}_j}{p_j} \right], \quad (11.54)$$

$$\mathbf{R}_{irs}^{(2)} = -p^2 \sum_j H_{ij}^{00} \frac{\pi_{jrs}}{p_j}, \quad (11.55)$$

$$\mathbf{R}_i^{(3)} = -\frac{5}{2} \frac{k}{m_i} p^2 \left[\sum_j \Lambda_{ij}^{11} \frac{\mathbf{h}_j}{p_j} - \frac{5}{2} \sum_{j \neq i} \Lambda_{ij}^{10} \mathbf{V}_j \right]. \quad (11.56)$$

Коэффициенты H_{ij}^{00} , Λ_{ij}^{01} , Λ_{ij}^{10} и Λ_{ij}^{11} выражаются через интегральные скобки от полиномов Сонина с помощью выражений (5.6) и (5.15). Использование конкретных соотношений, связывающих интегральные

скобки с Ω -интегралами, приводит к выражениям

$$\begin{aligned}
 H_{ii}^{00} &= \frac{x_i^2}{[\eta_{ii}]_1} + \sum_{\ell \neq i} \frac{2x_i x_\ell}{[\eta_{i\ell}]_1} \frac{m_i m_\ell}{(m_i + m_\ell)^2} \left(\frac{5}{3A_{i\ell}^*} + \frac{m_\ell}{m_i} \right), \\
 H_{ij}^{00} &= -\frac{2x_i x_j}{[\eta_{ij}]_1} \frac{m_i m_j}{(m_i + m_j)^2} \left(\frac{5}{3A_{ij}^*} - 1 \right); \quad j \neq i, \\
 \Lambda_{ii}^{00} &= \frac{4}{25} \sum_{j \neq i} \frac{x_i x_j}{[\mathfrak{D}_{ij}]_1}; \quad \Lambda_{ij}^{00} = -\frac{4}{25} \frac{x_i x_j}{[\mathfrak{D}_{ij}]_1}; \quad i \neq j, \\
 \Lambda_{ii}^{01} &= \frac{2}{5} \sum_{j \neq i} \frac{x_i x_j}{[\mathfrak{D}_{ij}]_1} \frac{\mu_{ij}}{m_i} \left(\frac{6}{5} C_{ij}^* - 1 \right), \\
 \Lambda_{ii}^{10} &= -\frac{2}{5} \frac{x_i x_j}{[\mathfrak{D}_{ij}]_1} \left(\frac{6}{5} C_{ij}^* - 1 \right); \quad i \neq j.
 \end{aligned} \tag{11.57}$$

Комментарий

Выражения для правых частей уравнений (11.49)–(11.51) для различающихся температур компонентов плазмы ($T_i \neq T$) указаны в [4, 5].

Уравнения переноса для малых чисел Кнудсена

Уравнения переноса (11.49)–(11.51) заметно упрощаются для малых чисел Кнудсена ($\text{Kn} \ll 1$), когда макроскопические параметры компонентов плазмы слабо меняются на расстояниях порядка средней характерной длины и за время свободного пробега частиц между столкновениями. При этом в них могут быть опущены члены с производными от соответствующих моментов по времени по сравнению с правыми частями уравнений, а также производные по координатам от π_{irs} и \mathbf{q}_{ir} , которые имеют второй порядок по числу Кнудсена. Уравнения (11.49)–(11.51) принимают при этом вид линейных соотношений переноса для определения параметров \mathbf{V}_i , π_{irs} и \mathbf{h}_i :

$$\begin{aligned}
 \sum_j \frac{n_i n_j kT}{n[\mathfrak{D}_{ij}]_1} (\mathbf{V}_i - \mathbf{V}_j) + \sum_j \xi_{ij} \left(\frac{\mathbf{h}_i}{m_i n_i} - \frac{\mathbf{h}_j}{m_j n_j} \right) = \\
 = -p\mathbf{d}_i + \rho_i [\mathbf{V}_i \times \boldsymbol{\omega}_i] + \frac{\rho_i}{\rho} [\mathbf{j} \times \mathbf{B}], \tag{11.58}
 \end{aligned}$$

$$p^2 \sum_{j=1}^N H_{ij}^{00} \frac{\pi_{jrs}}{p_j} = -2p_i \varepsilon_{rs} + \{ \pi_{ilr} \mathbf{e}_{slm} \boldsymbol{\omega}_{im} \}, \tag{11.59}$$

$$p^2 \sum_{j=1}^N \Lambda_{ij}^{11} \frac{\mathbf{h}_j}{p_j} + \sum_{j \neq i} \frac{kT^2}{m_i} \xi_{ij} (\mathbf{V}_i - \mathbf{V}_j) = -p_i \nabla T + \frac{2}{5} \frac{m_i}{k} [\mathbf{h}_i \times \boldsymbol{\omega}_i], \tag{11.60}$$

$$\xi_{ij} = \frac{n_i n_j}{n[\mathfrak{D}_{ij}]_1} \mu_{ij} \left(\frac{6}{5} C_{ij}^* - 1 \right). \tag{11.61}$$

Комментарии

1. Уравнения (11.58) и (11.60) разрешаются относительно параметров \mathbf{V}_i и \mathbf{h}_i для получения линейных соотношений, связывающих эти параметры с диффузионной термодинамической силой \mathbf{d}_i и градиентом температуры ∇T . В результате получаются выражения для компонентов векторов \mathbf{V}_i и \mathbf{h}_i , параллельных и перпендикулярных магнитному полю (см. [4, 5]).

2. Решение уравнений (11.59) для тензора вязких напряжений при наличии магнитного поля приводит к тензорным выражениям с пятью коэффициентами вязкости (см. [4, 5]).

3. В отсутствие магнитного поля решение уравнений (11.58)–(11.60) соответствует результатам полного второго приближения в разложении по полиномам Сонина в методе Чепмена–Энскога для смеси атомарных газов (см. гл. 4 и 5).

11.6. Линейные соотношения переноса в высших приближениях метода моментов

Назначение модели

Получение линейных соотношений переноса для многокомпонентной плазмы в произвольном приближении по числу полиномов Сонина, используемых в разложении функции распределения.

Допущения

1. Рассматривается изотермическая плазма ($T_i = T$).
2. Магнитное поле предполагается отсутствующим ($\mathbf{B} = 0$).
3. Выполнены условия, соответствующие малости числа Кнудсена ($\text{Kn} \ll 1$).

Разложение функции распределения

$$\begin{aligned}
 f_i &= f_i^{(0)}(1 + \phi_i); \quad f_i^{(0)} = n_i \left(\frac{m_i}{2\pi k T_i} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{m_i \mathbf{C}_i^2}{2k T_i} \right), \\
 \phi_i &= \sum_{\kappa=0}^{\infty} (-2)^{\kappa} \kappa! \left[\sigma_{1\kappa} \mathbf{a}_{ir}^{1\kappa} S_{3/2}^{(\kappa)}(W_i^2) \frac{W_r}{2} + \right. \\
 &\quad \left. + \sigma_{2\kappa} a_{irs}^{2\kappa} S_{5/2}^{(\kappa)}(W_i^2) \left(\frac{1}{4} W_r W_s - \frac{1}{6} W^2 \delta_{rs} \right) \right],
 \end{aligned} \tag{11.62}$$

где

$$\begin{aligned}
 \mathbf{W}_i &= \sqrt{\frac{m_i}{2kT}} \mathbf{C}_i; \quad \mathbf{C}_i = \mathbf{c}_i - \mathbf{v}, \\
 \sigma_{mn} &= \frac{(2m+1)!(m+\kappa)!}{\kappa!(m!)^2(2m+2\kappa+1)!}; \quad m = 1, 2.
 \end{aligned}$$

Комментарий

Приближение 13 моментов соответствует учету лишь коэффициентов \mathbf{a}^{10} , a^{20} и \mathbf{a}^{11} в разложении (11.62). При этом

$$\mathbf{a}_{ir}^{10} = \sqrt{\frac{m_i}{kT_i}} \mathbf{v}_i; \quad a_{irs}^{20} = \frac{\pi_{irs}}{p_i}; \quad \mathbf{a}_{ir}^{11} = 2\sqrt{\frac{m_i}{kT_i}} \frac{\mathbf{h}_i}{p_i}. \quad (11.63)$$

Уравнения для коэффициентов разложения $\mathbf{a}^{1\ell}$

$$\begin{aligned} \sum_j \sum_{\ell=0}^{\xi-1} C_{ij}^{0\ell} \mathbf{a}_j^{1\ell} &= -\sqrt{\frac{kT_i}{m_i}} n \mathbf{d}_i, \\ \sum_j \sum_{\ell=0}^{\xi-1} C_{ij}^{1\ell} \mathbf{a}_j^{1\ell} &= -5\sqrt{\frac{kT_i}{m_i}} n_i \nabla \ln T, \\ \sum_j \sum_{\ell=0}^{\xi-1} C_{ij}^{\kappa\ell} \mathbf{a}_j^{1\ell} &= 0; \quad 1 < \kappa \leq \xi - 1. \end{aligned} \quad (11.64)$$

Коэффициенты $C_{ij}^{\kappa\ell}$ являются линейными комбинациями интегральных скобок от полиномов Сонина и связаны с использованными ранее (см. главы 4 и 5) коэффициентами $\Lambda_{ij}^{\kappa\ell}$ соотношением

$$\Lambda_{ij}^{\kappa\ell} = \frac{8}{75} \frac{T}{p^2} m_i^{1/2} m_j^{1/2} (Q_{\kappa\ell})^{-1} C_{ij}^{\kappa\ell}, \quad Q_{\kappa\ell} = (-2)^{\kappa+\ell} \frac{4\kappa!(\ell+1)!}{(2\ell+3)!}. \quad (11.65)$$

Систему уравнений (11.64) удобно представить в форме, когда вместо первых двух коэффициентов \mathbf{a}_{ir}^{10} и \mathbf{a}_{ir}^{11} используются величины \mathbf{V}_{ir} и \mathbf{h}_{ir}/p_i , связанные с этими коэффициентами соотношениями (11.63). С учетом соотношений (11.65) уравнения (11.64) принимают вид

$$\sum_{j=1}^N \Lambda_{ij}^{00} \mathbf{V}_j - \frac{2}{5} \sum_{j=1}^N \Lambda_{ij}^{01} \frac{\mathbf{h}_i}{p_i} + \sum_{j=1}^N \sum_{\ell=2}^{\xi-1} \Lambda_{ij}^{0\ell} \mathbf{b}_j^{1\ell} = -\frac{4}{25} \frac{T}{p} \mathbf{d}_i, \quad (11.66)$$

$$\sum_{j=1}^N \Lambda_{ij}^{10} \mathbf{V}_j - \frac{2}{5} \sum_{j=1}^N \Lambda_{ij}^{11} \frac{\mathbf{h}_i}{p_i} + \sum_{j=1}^N \sum_{\ell=2}^{\xi-1} \Lambda_{ij}^{1\ell} \mathbf{b}_j^{1\ell} = \frac{2}{5} \frac{n_i}{n} \nabla \ln T, \quad (11.67)$$

$$\sum_{j=1}^N \Lambda_{ij}^{\kappa 0} \mathbf{V}_j - \frac{2}{5} \sum_{\beta=1}^N \Lambda_{ij}^{\kappa 1} \frac{\mathbf{h}_i}{p_i} + \sum_{j=1}^N \sum_{\ell=2}^{\xi-1} \Lambda_{ij}^{\kappa\ell} \mathbf{b}_j^{1\ell} = 0; \quad 1 < \kappa \leq \xi - 1. \quad (11.68)$$

Решение уравнений (11.67)–(11.68) имеет вид

$$\mathbf{h}_i = -\lambda_i \nabla T + nkT \sum_{j=1}^N k_{Tij} \mathbf{V}_j. \quad (11.69)$$

Соотношения Стефана–Максвелла

$$-p \mathbf{d}_i = \sum_{j \neq i}^N \frac{n_i n_j kT}{n[\mathfrak{D}_{ij}]_1 f_{ij}(\xi)} (\mathbf{V}_i - \mathbf{V}_j) + p k_{Ti} \nabla \ln T, \quad (11.70)$$

где

$$k_{Ti} = \sum_j k_{Tij}, \quad f_{ij}(\xi) = \frac{1}{1 - \Delta_{ij}(\xi)}. \quad (11.71)$$

Вектор плотности теплового потока

$$\mathbf{q} = \frac{5}{2} kT \sum_{i=1}^N n_i \mathbf{V}_i - \lambda(\xi) \nabla T + n kT \sum_{i=1}^N k_{Ti}(\xi) \mathbf{V}_i. \quad (11.72)$$

Комментарии

1. В формуле (11.64) ξ — номер используемого приближения в разложении по полиномам Сонина.

2. Уравнения (11.66)–(11.68) переходят в уравнения (11.58) и (11.60), соответствующие приближению 13 моментов, если положить равными нулю все коэффициенты $\mathbf{b}_j^{! \ell}$ при $\ell \geq 2$.

3. Соотношения Стефана–Максвелла следуют из уравнений (11.66) после подстановки в них решений для \mathbf{h}_i (11.69).

4. Выражение для вектора плотности теплового потока следует из определения

$$\mathbf{h}_i = \mathbf{q}_i - \frac{5}{2} p_i \mathbf{V}_i$$

и суммирования уравнений (11.69) по индексу i от 1 до N .

Уравнения (11.70) и соотношение (11.72) соответствуют результатам гл. 9, получаемым при использовании модифицированного метода Чепмена–Энскога. Выражения для коэффициентов переноса, входящие в выражения (11.70)–(11.72), рассматриваются в гл. 9 и 12.

Список литературы к главе 11

1. Чепмен С., Каулинг Т. Математическая теория неоднородных газов. — М.: Изд-во иностр. лит., 1960. — 510 с.
2. Ферцигер Дж., Капер Г. Математическая теория процессов переноса в газах. — М.: Мир, 1976. — 554 с.
3. Силин В.П. Введение в кинетическую теорию газов. — М.: Наука, Физматгиз, 1971. — 331 с.
4. Жданов В.М. Процессы переноса в многокомпонентной плазме. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2009. — 280 с.
5. Zhdanov V.M. Transport Processes in Multicomponent Plasma. — London–New York: Tailor&Francis, 2002. — 296 с.
6. Брагинский С.И. Явления переноса в плазме // Вопросы теории плазмы. Вып. 1. — М.: Атомиздат, 1963. — С. 183–272.

-
7. Митчнер М., Кругер Ч. Частично ионизованные газы. — М.: Мир, 1976. — 494 с.
 8. Grad H. // Handbuch der Physik / Ed. S. Flugge. — Berlin: Springer Verlag, 1958 (пер. в сб.: Термодинамика газов. — М.: Машиностроение, 1970. — С. 5–109).
 9. Жданов В. М., Тирский Г. А. Применение метода моментов к выводу уравнений переноса газа и плазмы с коэффициентами переноса в высших приближениях // Прикл. матем. и мех. 2003. Т. 67, вып. 3. С. 406–433.

Глава 12

КОЭФФИЦИЕНТЫ ПЕРЕНОСА В СЛАБОИОНИЗОВАННОМ ГАЗЕ И В ПЛАЗМЕ

При получении выражений для коэффициентов переноса в плазме в отсутствие внешнего магнитного поля используются результаты вычисления кинетических коэффициентов многокомпонентной ионизованной смеси газов на основе методов Чепмена–Энскога [1–8] или Грэда [9–13]. Общие приемы получения таких выражений рассматривались в главах 5, 8 и 11.

Для обеспечения достаточной точности при расчете коэффициентов переноса для ионизованных газов требуется использование более высоких приближений в разложении по полиномам Сонина [4–8, 10, 13], поэтому ниже приводятся выражения для соответствующих коэффициентов через определители более высокого порядка, чем в случае газа нейтральных частиц. Представлены выражения для коэффициентов переноса электронов, которые заметно упрощаются благодаря наличию малого параметра — отношения массы электрона к массе тяжелых частиц плазмы m_e/m_h [5, 10, 11]. Рассматриваются выражения для коэффициентов переноса, получаемые на основе лорентцевского приближения для слабоионизованного газа [1, 2], а также в результате прямого численного интегрирования уравнений метода Чепмена–Энскога для полностью ионизованного газа [14]. Для коэффициентов переноса полностью ионизованного газа приводятся модели Брагинского [3] и Спитцера [15].

12.1. Коэффициенты переноса плазмы в произвольном приближении по числу полиномов Сонина

12.1.1. Коэффициент вязкости

$$[\eta]_\xi = -\frac{1}{|H|} \begin{vmatrix} H_{rs}^{0,0} & H_{rs}^{0,1} & \dots & H_{rs}^{0,\xi-1} & x_r \\ H_{rs}^{1,0} & H_{rs}^{1,1} & \dots & H_{rs}^{1,\xi-1} & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ H_{rs}^{\xi-1,0} & H_{rs}^{\xi-1,1} & \dots & H_{rs}^{\xi-1,\xi-1} & 0 \\ x_s & 0 & \dots & 0 & 0 \end{vmatrix}. \quad (12.1)$$

Здесь $H_{rs}^{m,p}$ — свернутое обозначение квадратной матрицы порядка $N \times N$, составленной из элементов $H_{ij}^{m,p}$, $|H|$ — определитель матрицы, образованной из матрицы числителя путем исключения из нее последнего столбца и последней строки, x_s и x_r — строка и столбец значений x_i ($i = 1, \dots, N$).

Комментарии

1. В первом приближении ($\xi = 1$) выражение для $[\eta]_1$ (12.1) совпадает с формулой (5.42).

2. Коэффициенты $H_{ij}^{m,p}$ записываются через парциальные интегральные скобки с применением выражений (5.43). Выражения для парциальных скобок через Ω -интегралы для $p, q = 0, 1$ приводятся в разд. 5.5, что обеспечивает возможность расчета коэффициента вязкости плазмы вплоть до второго приближения ($\xi = 2$). Выражения для парциальных скобок при $p, q = 0, 1, 2$, что соответствует $\xi = 3$, приводятся в [1].

3. Расчеты коэффициентов $[\eta]_\xi$ для ряда частично ионизованных газовых смесей [7, 14] показывают, что при малой степени ионизации плазмы коэффициенты вязкости практически совпадают с коэффициентами вязкости нейтральных газов. При этом относительная погрешность расчета коэффициента вязкости в первом приближении ($\xi = 1$) составляет 1–1,5 %. При промежуточных и высоких степенях ионизации плазмы относительная погрешность расчетов в первом приближении составляет около 10–15 %, а во втором приближении ($\xi = 2$) — порядка 1 %.

12.1.2. Коэффициент теплопроводности

$$[\lambda]_\xi = -\frac{1}{|\Lambda|} \begin{vmatrix} \Lambda_{rs}^{1,1} & \Lambda_{rs}^{1,2} & \dots & \Lambda_{rs}^{1,\xi-1} & x_r \\ \Lambda_{rs}^{2,1} & \Lambda_{rs}^{2,2} & \dots & \Lambda_{rs}^{2,\xi-1} & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \Lambda_{rs}^{\xi-1,1} & \Lambda_{rs}^{\xi-1,2} & \dots & \Lambda_{rs}^{\xi-1,\xi-1} & 0 \\ x_s & 0 & \dots & 0 & 0 \end{vmatrix}. \quad (12.2)$$

Комментарии

1. Во втором (или первом не исчезающем) приближении ($\xi = 2$) выражение для $[\lambda]_1$ (12.2) совпадает с формулой (5.57).

2. Коэффициенты $\Lambda_{ij}^{m,p}$ записываются через парциальные интегральные скобки с использованием выражений (5.55). Выражения для парциальных скобок через Ω -интегралы для $p, q = 1, 2$ приводятся в разд. 5.5, что обеспечивает возможность расчета коэффициента теплопроводности плазмы вплоть до третьего приближения ($\xi = 3$).

3. Расчеты коэффициентов $[\lambda]_\xi$ для ряда частично ионизованных газовых смесей [7, 14] показывают, что в области промежуточных

и высоких степеней ионизации плазмы относительная погрешность расчета коэффициента теплопроводности во втором (первом неисчисляющем) приближении ($\xi = 2$) составляет до 40–65 %, а в третьем приближении — около 1 %.

12.1.3. Коэффициенты диффузии и термодиффузии

Выражения для коэффициентов переноса, входящих в соотношения Стефана–Максвелла (формула (11.70)):

Коэффициент бинарной диффузии определяется выражением (5.67).

Термодиффузионные отношения k_{Ti}

$$[k_{Ti}]_{\xi \geq 2} = -\frac{5}{2} \frac{1}{|\Lambda|} \begin{vmatrix} 0 & x_s & 0 & \dots & 0 \\ \Lambda_{ri}^{1,0} & \Lambda_{rs}^{1,1} & \Lambda_{rs}^{1,1} & \dots & \Lambda_{rs}^{1,\xi-1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \Lambda_{ri}^{\xi-1,0} & \Lambda_{rs}^{\xi-1,1} & \Lambda_{rs}^{\xi-1,2} & \dots & \Lambda_{rs}^{\xi-1,\xi-1} \end{vmatrix}. \quad (12.3)$$

Поправочные коэффициенты Δ_{ij} к коэффициентам бинарной диффузии

$$[\Delta_{ij}]_{\xi \geq 2} = \frac{25}{4} \frac{p}{T} \frac{[\mathfrak{D}_{ij}]_1}{x_i x_j} \frac{1}{|\Lambda|} \begin{vmatrix} 0 & \Lambda_{js}^{0,1} & \dots & \Lambda_{js}^{0,\xi-1} \\ \Lambda_{ri}^{1,0} & \Lambda_{rs}^{1,1} & \dots & \Lambda_{rs}^{1,\xi-1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \Lambda_{ri}^{\xi-1,0} & \Lambda_{rs}^{\xi-1,1} & \dots & \Lambda_{rs}^{\xi-1,\xi-1} \end{vmatrix}. \quad (12.4)$$

Комментарий

Коэффициенты $\Lambda_{ij}^{m,p}$ записываются через парциальные интегральные скобки с помощью выражений (5.55). Выражения для парциальных скобок через Ω -интегралы для $p, q = 0, 1, 2$ приводятся в разд. 5.5.

12.1.4. Коэффициент электропроводности многокомпонентной плазмы

Коэффициент электропроводности плазмы σ входит в линейное соотношение, связывающее плотность тока проводимости \mathbf{j} с напряженностью электрического поля \mathbf{E} . Плотность тока проводимости определена соотношением

$$\mathbf{j} = \sum_{i=1}^N n_i e_i \mathbf{V}_i = \sum_{i=1}^{N-1} n_i e_i (\mathbf{V}_i - \mathbf{V}_{N-1}). \quad (12.5)$$

Комментарии

1. Для электронов $e_1 = -e$, для положительных ионов $e_k = Z_k e$, где Z_k — кратность ионизации, e — элементарный электрический заряд.

2. Суммирование в выражении (12.5) производится по всем заряженным компонентам плазмы (электронам и ионам). Оно может быть

распространено на все N компонентов смеси, включая нейтральные, поскольку для нейтральных атомов и молекул $e_k = 0$. Исключение из суммирования $N - 1$ -го компонента осуществляется с использованием условия квазинейтральности

$$\sum_{i=1}^N n_i e_i = 0. \quad (12.6)$$

Коэффициент электропроводности

$$[\sigma]_\xi = -\frac{1}{|a|} \begin{vmatrix} n_1 e_1 & n_2 e_2 & \dots & n_{N-1} e_{N-1} & 0 \\ a_{1,1} & a_{1,2} & \dots & a_{1,N-1} & n_1 e_1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{N-1,1} & a_{N-1,2} & \dots & a_{N-1,N-1} & n_{N-1} e_1 \end{vmatrix}. \quad (12.7)$$

Коэффициенты a_{ii} и a_{ij}

$$\begin{aligned} a_{ii} &= \sum_{\ell=1}^{N-1} \frac{p x_i x_\ell}{[\mathfrak{D}_{i\ell}]_1} [1 - \Delta_{i\ell}(\xi)], \\ a_{ij} &= -\frac{p x_i x_j}{[\mathfrak{D}_{ij}]_1} [1 - \Delta_{ij}(\xi)] \quad (j \neq i). \end{aligned} \quad (12.8)$$

Комментарий

Для определения коэффициента электропроводности необходимо найти выражения для разностей диффузионных скоростей, входящих в правую часть формулы (12.5). Для этого используется решение уравнений Стефана–Максвелла, которые, если ввести переменную $\mathbf{X}_j = \mathbf{V}_j - \mathbf{V}_{N-1}$, записываются в следующей форме [4, 5]:

$$\sum_{j=1}^{N-1} a_{ij} \mathbf{X}_j = n_i e_i \mathbf{E} - \left(\nabla p_i - \frac{\rho_i}{\rho} \nabla p \right) - [k_{Ti}]_\xi \frac{p}{T} \nabla T. \quad (12.9)$$

Выражение для плотности тока проводимости имеет при этом вид

$$\mathbf{j} = \sum_{i=1}^{N-1} n_i e_i \mathbf{X}_i. \quad (12.10)$$

Коэффициент электропроводности определяется той частью решения, которая пропорциональна напряженности поля \mathbf{E} . Полное решение уравнений (12.9) позволяет найти также вклад в плотность тока \mathbf{j} , связанный с градиентами парциального давления компонентов и градиентом температуры.

12.2. Свойства переноса электронов в произвольном приближении по числу полиномов Сонина

12.2.1. Выражения для потоков при $T_e \gg T_{\text{ion}}$

Вектор плотности массового диффузионного потока электронов

$$\mathbf{J}_e = \rho_e \mathbf{V}_e = -m_e n_e \left(D_e \mathbf{d}_e + D_{T_e} \frac{1}{T_e} \nabla T_e \right) = \quad (12.11)$$

$$- m_e n_e D_e \left(\mathbf{d}_e + k_{T_e} \frac{1}{T_e} \nabla T_e \right),$$

$$p \mathbf{d}_e = n_e e \mathbf{E} + \nabla p_e = n_e e \mathbf{E}^*. \quad (12.12)$$

Вектор плотности тока проводимости

$$\mathbf{j} = -n_e e \mathbf{V}_e = \sigma \mathbf{E}^* + \varphi \nabla T_e. \quad (12.13)$$

Вектор плотности теплового потока, обусловленного электронами

$$\mathbf{q}_e = -\frac{5}{2} \frac{k T_e}{e} \mathbf{j} - \lambda'_e \nabla T_e - \varphi T_e \mathbf{E}^*. \quad (12.14)$$

Другая форма записи \mathbf{q}_e

$$\mathbf{q}_e = -\lambda_e \nabla T_e - \alpha T_e \mathbf{j}, \quad (12.15)$$

$$\lambda_e = \lambda'_e - \left(\frac{\varphi^2 T_e}{\sigma} \right); \quad \alpha = \left(\frac{5}{2} \frac{k}{e} + \frac{\varphi}{\sigma} \right). \quad (12.16)$$

Обозначения

ρ_e — массовая плотность электронов

\mathbf{V}_e — диффузионная скорость электронов

p_e — парциальное давление электронов

p — полное давление

Комментарии

1. Выражения (12.11)–(12.16) для плотности потоков, обусловленных переносом электронов, следуют из решения линеаризованного уравнения Больцмана с помощью метода Чепмена–Энскога [4–7] или метода моментов Грэда [10–13] в приближении малости отношения массы электрона к массе тяжелых частиц плазмы. При этом уравнения для поправок к функции распределения электронов отделяются от соответствующих уравнений для тяжелых частиц.

2. Выражение для плотности тока проводимости $\mathbf{j} = -n_e e \mathbf{V}_e$ следует из общего выражения $\mathbf{j} = \sum_k n_k e_k \mathbf{V}_k$, в котором в том же приближении по параметру малости можно пренебречь диффузионным переносом ионов по сравнению с диффузией электронов.

12.2.2. Коэффициенты переноса*Коэффициент диффузии электронов*

$$[D_e]_\xi = \frac{3}{2} n \left(\frac{2\pi k T_e}{m_e} \right)^{1/2} \frac{1}{|q|} \begin{vmatrix} q^{1,1} & q^{1,2} & \dots & q^{1,\xi-1} \\ q^{2,1} & q^{2,2} & \dots & q^{1,\xi-1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ q^{\xi-1,1} & q^{\xi-1,2} & \dots & q^{\xi-1,\xi-1} \end{vmatrix}. \quad (12.17)$$

Коэффициент термодиффузии электронов

$$[D_{T_e}]_\xi = \frac{15}{4} n_e^2 \left(\frac{2\pi k T_e}{m_e} \right)^{1/2} \frac{1}{|q|} \begin{vmatrix} q^{0,1} & q^{0,2} & \dots & q^{0,\xi-1} \\ q^{2,1} & q^{2,2} & \dots & q^{1,\xi-1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ q^{\xi-1,1} & q^{\xi-1,2} & \dots & q^{\xi-1,\xi-1} \end{vmatrix}. \quad (12.18)$$

Коэффициент электропроводности плазмы

$$[\sigma]_\xi = \frac{n_e^2 e^2}{p} [D_e]_\xi. \quad (12.19)$$

Термоэлектрический коэффициент

$$[\varphi]_\xi = \frac{n_e e}{T_e} [D_{T_e}]_\xi. \quad (12.20)$$

Коэффициент теплопроводности электронного газа

$$[\lambda'_e]_\xi = \frac{75}{8} k n_e^2 \left(\frac{2\pi k T_e}{m_e} \right)^{1/2} \frac{1}{|q|} \begin{vmatrix} q^{0,0} & q^{0,2} & \dots & q^{0,\xi-1} \\ q^{2,0} & q^{2,2} & \dots & q^{1,\xi-1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ q^{\xi-1,0} & q^{\xi-1,2} & \dots & q^{\xi-1,\xi-1} \end{vmatrix}. \quad (12.21)$$

Истинный коэффициент теплопроводности электронного газа

$$[\lambda_e]_\xi = \frac{75}{8} k n_e^2 \left(\frac{2\pi k T_e}{m_e} \right)^{1/2} \frac{1}{|q|^*} \begin{vmatrix} q^{2,2} & q^{2,3} & \dots & q^{2,\xi-1} \\ q^{3,2} & q^{3,3} & \dots & q^{3,\xi-1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ q^{\xi-1,2} & q^{\xi-1,3} & \dots & q^{\xi-1,\xi-1} \end{vmatrix}. \quad (12.22)$$

Комментарии

1. Определитель $|q|$ системы алгебраических уравнений для нахождения коэффициентов переноса, обусловленного электронами, имеет вид

$$|q| = \begin{vmatrix} q^{0,0} & q^{0,1} & \dots & q^{0,\xi-1} \\ q^{1,0} & q^{1,1} & \dots & q^{1,\xi-1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ q^{\xi-1,0} & q^{\xi-1,1} & \dots & q^{\xi-1,\xi-1} \end{vmatrix}. \quad (12.23)$$

2. Определитель $|q|^*$ в выражении (12.22) получается из определителя $|q|$ (12.23), если вычеркнуть в последнем элементы $q^{m,p}$ с $m = 0$ или $p = 0$.

3. Элементы определителей $q^{m,p}$ записываются через интегральные скобки для электронного компонента с использованием выражений, введенных в [5]:

$$q^{m,p} = \sqrt{\frac{2\pi m_e}{kT_e}} \left\{ n_e^2 [W_e S_{3/2}^{(m)}(W_e^2); W_e S_{3/2}^{(p)}(W_e^2)]_e + \sum_{k=2}^N n_e n_k [W_e S_{3/2}^{(m)}(W_e); W_e S_{3/2}^{(p)}(W_e^2)]_{ek} \right\}, \quad (12.24)$$

где $W_e = (m_e/2kT_e)^{1/2} v_e$, v_e — скорость электронов. Интегральные скобки записываются в виде линейных комбинаций интегралов $\Omega^{(\ell,s)}$ или усредненных транспортных сечений $\overline{Q^{(\ell,s)}} = \pi \sigma^2 \Omega^{(\ell,s)*}$.

4. Приводимые выше выражения для коэффициентов переноса электронов следуют из решения систем алгебраических уравнений, получаемых методом Чепмена–Энскога или методом моментов Грэда на основе разложения поправок к функции распределения электронов в ряды по полиномам Сонина. Они могут быть также получены упрощением определителей, входящих в общие выражения для коэффициентов переноса многокомпонентной плазмы, если пренебрегать в них членами порядка $(m_e/m_h)^{1/2}$ по отношению к оставленным, где m_h — масса тяжелых частиц плазмы.

5. Здесь не приводится выражение для коэффициента вязкости электронов, поскольку вклад вязкости электронного газа в общую вязкость плазмы имеет порядок $(m_e/m_h)^{1/2}$ по отношению к вязкости тяжелых компонентов.

12.3. Свойства переноса электронного компонента в слабоионизованной плазме (модель лорентцева газа)

Назначение

Получение выражений для плотности тока, вектора плотности теплового потока, обусловленного электронами, и коэффициентов переноса для электронного компонента в слабоионизованной плазме.

Допущения

1. Плазма предполагается слабоионизованной. Концентрация электронов удовлетворяет условию $n_e Q_{ei} \ll n_n Q_{en}$, где Q_{ei} и Q_{en} — транспортные сечения столкновений электронов с ионами и нейтральными частицами соответственно (определения этих величин см. в гл.6).

Взаимодействием электронов плазмы с ионами и электронов между собой можно пренебречь по сравнению с взаимодействием электронов с нейтральными частицами (атомами и молекулами).

2. Температура электронов и тяжелых частиц различаются.

3. Температуры тяжелых частиц предполагаются одинаковыми.

4. Напряженность электрического поля удовлетворяет условию, при котором функция распределения электронов по скоростям слабо отличается от максвелловской функции распределения, определяемой при температуре электронов T_e (см. введение, [2]).

Выражения для потоков

Линейные соотношения для плотности тока проводимости и плотности теплового потока определяются соотношениями (12.11)–(12.15).

Коэффициенты переноса

Коэффициент электропроводности

$$\sigma = \frac{8}{3\sqrt{\pi}} \frac{n_e e^2}{m_e} \int_0^{\infty} \frac{W_e^4}{\nu_{en}(v_e)} \exp(-W_e^2) dW_e. \quad (12.25)$$

Термоэлектрический коэффициент

$$\varphi = \frac{8}{3\sqrt{\pi}} \frac{n_e e k}{m_e} \int_0^{\infty} \frac{W_e^4}{\nu_{en}(v_e)} \left(W_e^2 - \frac{5}{2} \right) \exp(-W_e^2) dW_e. \quad (12.26)$$

Коэффициент теплопроводности

$$\lambda'_e = \frac{8}{3\sqrt{\pi}} \frac{k^2 n_e T_e}{m_e} \int_0^{\infty} \frac{W_e^6}{\nu_{en}(v_e)} \left(W_e^2 - \frac{5}{2} \right)^2 \exp(-W_e^2) dW_e. \quad (12.27)$$

Коэффициенты λ_e и α определяются соотношениями (12.16).

Определения

Эффективная частота столкновений электронов с нейтральными частицами

$$\nu_{en}(v_e) = n_n v_e \int \sigma_{en}(g_{en}, \chi) (1 - \cos \chi) d\Omega. \quad (12.28)$$

Безразмерная относительная скорость электронов

$$W_e = \left(\frac{m_e}{2kT_e} \right)^{1/2} v_e. \quad (12.29)$$

Комментарии

1. Выражения (12.25)–(12.27) получаются из решения линеаризованного кинетического уравнения Больцмана для модели лорентцева газа [1, 2], в которой масса частиц одного из компонентов (в данном

случае — электронов) заметно меньше массы остальных (тяжелых) частиц, а плотность легкого компонента достаточно мала, так что можно пренебречь взаимодействием легких частиц друг с другом по сравнению с их взаимодействием с тяжелыми частицами.

2. Усредненные транспортные сечения столкновений электронов с тяжелыми частицами (или интегралы столкновений) $\overline{Q_{eh}}$ определяются выражением

$$\overline{Q_{eh}^{(1,1)}} = \int W_e^5 \exp(-W_e^2) \sigma_{eh}(g_{eh}) (1 - \cos \chi) d\Omega dW_e \quad (12.30)$$

(см. гл. 6).

12.4. Коэффициенты переноса в полностью ионизованной плазме

Назначение модели

Получение выражений для неравновесных потоков и коэффициентов переноса в полностью ионизованной плазме.

Допущения

1. Плазма образована из электронов и ионов компонента i с зарядом $e_i = Ze$.

2. Выполняется условие квазинейтральности плазмы, из которого следует $n_e = Zn_i$.

3. Температура электронов T_e отличается от ионной температуры T_i (далее индекс i у температуры ионов опускается).

Переносные свойства

Плотность тока проводимости

$$\mathbf{j} = -n_e e \mathbf{V}_e = \sigma \mathbf{E}^* + \varphi \nabla T_e. \quad (12.31)$$

Вектор плотности теплового потока, обусловленного электронами

$$\mathbf{q}_e = -\frac{5}{2} \frac{kT_e}{e} \mathbf{j} - \lambda'_e \nabla T_e - \varphi T_e \mathbf{E}^* \quad (12.32)$$

или

$$\mathbf{q}_e = -\lambda_e \nabla T_e - \alpha T_e \mathbf{j}. \quad (12.33)$$

Вектор плотности теплового потока, обусловленного ионами

$$\mathbf{q}_{ion} = -\lambda_{ion} \nabla T. \quad (12.34)$$

Бездивергентный тензор напряжений

$$\pi_{ion,rs} = -\eta_{ion} W_{rs}, \quad (12.35)$$

где

$$W_{rs} = \frac{\partial u_r}{\partial x_s} + \frac{\partial u_s}{\partial x_r} - \frac{2}{3} \delta_{rs} \frac{\partial u_\ell}{\partial x_\ell}.$$

Комментарий

Вклад вязкости электронного газа в тензор вязких напряжений в $(m_e/m_{\text{ion}})^{1/2}$ раз меньше вклада вязкости ионов и поэтому не рассматривается.

12.4.1. Коэффициенты переноса в приближении Спитцера

Коэффициенты переноса плазмы

Коэффициенты переноса в однократно ионизованной плазме
($Z = 1$)

Коэффициент электропроводности

$$\sigma = 1,975 \frac{n_e e^2}{m_e} \tau_{ei}. \quad (12.36a)$$

Коэффициент теплопроводности

$$\lambda_e = 3,203 \frac{n_e k^2 T_e}{m_e} \tau_{ei}. \quad (12.36b)$$

Термоэлектрический коэффициент

$$\varphi = 1,389 \frac{n_e e k}{m_e} \tau_{ei}. \quad (12.36b)$$

Коэффициенты переноса в полностью ионизованной плазме
($Z \rightarrow \infty$)

Коэффициент электропроводности

$$\sigma = 3,396 \frac{n_e e^2}{m_e} \tau_{ei}. \quad (12.37a)$$

Коэффициент теплопроводности

$$\lambda_e = 13,58 \frac{n_e k^2 T_e}{m_e} \tau_{ei}. \quad (12.37b)$$

Термоэлектрический коэффициент

$$\varphi = 5,093 \frac{n_e e k}{m_e} \tau_{ei}. \quad (12.37b)$$

В обоих случаях

Частота столкновений

$$\tau_{ei}^{-1} = \frac{4\sqrt{2\pi}}{3} n_i \left(\frac{m_e}{kT_e} \right)^{3/2} \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 m_e} \right)^2 \ln \Lambda, \quad (12.38)$$

где

$$\Lambda = 12\pi \frac{\varepsilon_0^{3/2} k T_e}{Z e^2} \left[\frac{k T_e}{2 n_e e^2 (1 + Z)} \right]^{1/2} \quad \text{при } T_e = T, \quad (12.39)$$

$$\Lambda = 12\pi \frac{\varepsilon_0^{3/2} k T_e}{Z e^2} \left(\frac{k T_e}{2 n_e e^2 Z} \right)^{1/2} \quad \text{при } T_e \gg T. \quad (12.40)$$

Комментарии

1. Выражения (12.36)–(12.37) получены методом численного интегрирования интегро-дифференциальных уравнений Чепмена–Энскога с использованием интеграла столкновений в форме Ландау [3, 15]. Наряду с электрон-ионными учитываются электрон-электронные столкновения, при этом $\tau_{ee}^{-1} = \sqrt{2} \tau_{ei}^{-1}$ при $Z = 1$.

2. Полученные выражения справедливы при условии $\ln \Lambda \gg 1$. При этом принимается, что $\ln \Lambda_{ei} \approx \ln \Lambda_{ee} \approx \ln \Lambda$. На основе теории, в которой эффект экранирования кулоновского потенциала при взаимодействии частиц учитывается точнее [4], показано, что при более мягком условии $\Lambda \gg 1$ можно приближенно заменять $\ln \Lambda$ в соответствующих выражениях на $(\ln \Lambda - 1,37)$.

12.4.2. Коэффициенты переноса в приближении Брагинского

Коэффициенты переноса электронного и ионного компонентов плазмы

Коэффициенты переноса для электронного компонента

Коэффициент электропроводности

$$\sigma = \frac{n_e e^2}{m_e \alpha} \tau_{ei}. \quad (12.41a)$$

Коэффициент теплопроводности

$$\lambda_e = \beta \frac{n_e k^2 T}{m_e} \tau_{ei}. \quad (12.41б)$$

Термоэлектрический коэффициент

$$\varphi = \gamma \frac{n_e e k}{m_e} \tau_{ei}. \quad (12.41в)$$

Значения коэффициентов α , β и γ для различных значений Z приведены в табл. 12.1.

Коэффициенты переноса для электронного компонента однократно ионизованной плазмы ($Z = 1$)

Коэффициент электропроводности

$$\sigma = 1,950 \frac{n_e e^2}{m_e} \tau_{ei}. \quad (12.42a)$$

Таблица 12.1. Коэффициенты α , β , γ
в формулах Брагинского (12.41а), (12.41б), (12.41в)

	$Z = 1$	$Z = 2$	$Z = 3$	$Z = 4$	$Z \rightarrow \infty$
α	0,5129	0,4408	0,3965	0,3752	0,2949
β	3,162	4,890	6,064	6,920	12,47
γ	1,386	2,053	2,562	2,905	5,158

Коэффициент теплопроводности

$$\lambda_e = 3,162 \frac{n_e k^2 T}{m_e} \tau_{ei}. \quad (12.42б)$$

Термоэлектрический коэффициент

$$\varphi = 1,387 \frac{n_e e k}{m_e} \tau_{ei}. \quad (12.42в)$$

Коэффициенты переноса для электронного компонента плотности ионизованной плазмы ($Z \rightarrow \infty$)

Коэффициент электропроводности

$$\sigma = 3,391 \frac{n_e e^2}{m_e} \tau_{ei}. \quad (12.43а)$$

Коэффициент теплопроводности

$$\lambda_e = 12,47 \frac{n_e k^2 T}{m_e} \tau_{ei}. \quad (12.43б)$$

Термоэлектрический коэффициент

$$\varphi = 5,158 \frac{n_e e k}{m_e} \tau_{ei}. \quad (12.43в)$$

Коэффициенты переноса ионного компонента

Коэффициент теплопроводности

$$\lambda_i = 12,81 \frac{n_i k^2 T_i}{m_i} \tau_{ii}. \quad (12.44а)$$

Коэффициент вязкости

$$\eta_i = 1,92 n_i k T_i \tau_{ii}. \quad (12.44б)$$

Здесь

$$\tau_{ii}^{-1} = \frac{1}{6\varepsilon_0^2} n_i \left[\frac{Z^4 e^4}{m_i^{1/2} (\pi k T_i)^{3/2}} \right] \ln \Lambda. \quad (12.45)$$

Комментарий

Коэффициенты переноса в приближении Брагинского вычисляются на основе решения линеаризованного кинетического уравнения для плазмы с интегралом столкновений Ландау. Уравнения для электронов отделяются от уравнений для ионов. Решение ищется с помощью

метода Чепмена–Энскога с использованием третьего приближения в разложении по полиномам Сонина [3]. Это приближение дает значения всех кинетических коэффициентов полностью ионизованной плазмы, практически близкие к точным значениям, получаемым численным методом.

Список литературы к главе 12

1. Ферцигер Дж., Капер Г. Математическая теория процессов переноса в газах. — М.: Мир, 1976. — 554 с.
2. Митчнер М., Кругер Ч. Частично ионизованные газы. — М.: Мир, 1976. — 494 с.
3. Брагинский С.И. Явления переноса в плазме // Вопросы теории плазмы / Под ред. М.А. Леонтовича. Вып. 1. — М.: Госатомиздат, 1963. — С. 183–272.
4. Devoto R. S. Transport properties of ionized monoatomic gases // Phys. Fluids. 1966. V. 9, № 6. P. 1230–1240.
5. Devoto R. S. Simplified expressions for the transport properties of ionized monoatomic gases // Phys. Fluids. 1967. V. 10, № 10. P. 2105–2112.
6. Колесников А. Ф., Тирский Г. А. Уравнения гидродинамики для частично ионизованных многокомпонентных смесей газов с коэффициентами переноса в высших приближениях // Молекулярная газодинамика. — М.: Наука, 1982. — С. 20–44.
7. Васильевский С. А., Соколова И. А., Тирский Г. А. Точные уравнения и коэффициенты переноса для многокомпонентных смесей газов и частично ионизованной плазмы // ПМТФ. 1984. № 4. С. 15–24.
8. Соколова И. А. Кинетические методы в расчетах свойств плазмы // Энциклопедия низкотемпературной плазмы / Под ред. В.Е. Фортова. Вводный Т. 3. — М.: Наука, 2000. — С. 252–263.
9. Силин В. П. Введение в кинетическую теорию газов. — М.: Наука, 1971. — 331 с.
10. Жданов В. М. Процессы переноса в многокомпонентной плазме. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2009. — 280 с.
11. Zhdanov V. M. Transport Processes in Multicomponent Plasma. — London–New York: Taylor & Francis, 2002. — 296 p.
12. Жданов В. М. Классическая кинетическая теория явлений переноса в многокомпонентной плазме // Энциклопедия низкотемпературной плазмы / Под ред. В.Е. Фортова. Вводный Т. 1. — М.: Наука, 2000. — С. 511–523.
13. Жданов В. М., Тирский Г. А. Применение метода моментов к выводу уравнений переноса газа и плазмы с коэффициентами переноса в высших приближениях // Прикл. матем. и мех. 2003. Т. 67, вып. 3. С. 406–433.
14. Соколова И. А. Компьютеризованная библиотека транспортных свойств атмосферных газов и плазмы // Матем. моделирование. 1998. Т. 10, № 2. С. 25–40.
15. Спитцер Л. Физика полностью ионизованного газа. — М.: Мир, 1965. — 212 с.

Справочное издание

*ЖДАНОВ Владимир Михайлович
ГАЛКИН Владлен Сергеевич
ГОРДЕЕВ Олег Анатольевич
СОКОЛОВА Ирина Алексеевна*

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ В ГАЗОВОЙ ДИНАМИКЕ

Том 3

**МОДЕЛИ ПРОЦЕССОВ МОЛЕКУЛЯРНОГО ПЕРЕНОСА
В ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКОЙ ГАЗОДИНАМИКЕ**

Редактор *И.В. Авилова*
Оригинал-макет: *Е.Н. Водоватова*
Оформление переплета: *М.В. Кулага*

Подписано в печать 26.12.2012. Формат 60×90/16. Бумага офсетная.
Печать офсетная. Усл. печ. л. 17,75. Уч.-изд. л. 19,5. Тираж 400 экз.
Заказ №

Издательская фирма «Физико-математическая литература»
МАИК «Наука/Интерпериодика»
117997, Москва, ул. Профсоюзная, 90
E-mail: fizmat@maik.ru, fmlsale@maik.ru;
<http://www.fml.ru>

Отпечатано в ГУП
«ИПК Чувашия», 428019
г. Чебоксары, пр-т И.Яковлева, 13