

ВЫЧИСЛЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТОВ ПЕРЕНОСА МНОГОКОМПОНЕНТНОГО ГАЗА И ПЛАЗМЫ

Соколова И.А., Васильевский С.А., Андриатис А.В.

Москва, vasil@ipmnet.ru

В работе приведены уравнения переноса и входящие в эти уравнения коэффициенты переноса - вязкость, теплопроводность, электропроводность, коэффициенты, характеризующие диффузионные и термодиффузионные свойства компонент. Приведены формулы для расчета коэффициентов переноса с учетом высших приближений метода Чепмена-Энскога и результаты расчетов для различных газов (воздух, углекислый газ, аргон) в широком диапазоне давления (0.0001 - 100 атм) и температуры (300 - 20 000 К). Для химически равновесной смеси приведена компактная форма записи уравнений переноса и формулы для эффективных коэффициентов, учитывающих вклад равновесных химических реакций, с учетом высших приближений. Исследуется сходимость коэффициентов переноса и эффективных коэффициентов с увеличением номера приближения. Дано краткое описание моделей потенциалов взаимодействия частиц и интегралов столкновений, использованных при расчете коэффициентов переноса.

Основные обозначения

Термодинамические параметры и химический состав:

- P - давление,
- T - температура,
- N - общее число компонент смеси,
- ρ - плотность смеси,
- h - удельная энтальпия смеси,
- c_p - удельная теплоемкость смеси при постоянном давлении,
- x_k - молярные концентрации компонент, $k=1, \dots, N$,
- h_k - удельные энтальпии компонент,
- c_{pk} - удельные теплоемкости компонент при постоянном давлении,
- q_k - удельные теплоты образования компонент (теплоты реакций).

Коэффициенты переноса:

- μ - вязкость смеси,
- λ^{tr} - теплопроводность смеси за счет поступательных степеней свободы,
- λ^{int} - теплопроводность смеси за счет внутренних степеней свободы,
- λ - теплопроводность смеси, $\lambda = \lambda^{tr} + \lambda^{int}$,
- σ - электропроводность плазмы,
- ξ - номер приближения, т.е. число членов, учитываемых в разложениях возмущенных функций распределения по полиномам Сонина.

Эффективные коэффициенты для равновесно реагирующей смеси:

- c_{pr} - вклад в удельную теплоемкость при постоянном давлении за счет равновесных реакций,
 c_{peff} - полная (эффективная) удельная теплоемкость при постоянном давлении,
 λ_r - вклад в теплопроводность за счет равновесных реакций,
 λ_{eff} - эффективная теплопроводность, $\lambda_{eff} = \lambda + \lambda_r$,
 Pr_{eff} - эффективное число Прандтля.

Термодиффузионные свойства компонент:

- k_{Tk} - термодиффузионные отношения, $k=1, \dots, N$,
 D_{Tk} - коэффициенты термодиффузии.

Коэффициенты диффузии для пар компонент:

- Δ_{ik} - диффузионные коэффициенты сопротивления, $i, k=1, \dots, N$,
 D_{ik} - многокомпонентные коэффициенты диффузии.

Введение

В работе дано математическое описание переносных свойств многокомпонентных смесей газов с учетом химических реакций и ионизации на основе метода Чепмена-Энскога [1,2].

Далее перечислены основные предположения, используемые в работе.

- Газовая смесь рассматривается как смесь идеальных разреженных газов, т.е. имеют место соотношения: $d^* \ll l^* \ll L^*$, где d^* - средний размер частицы, l^* - средняя длина свободного пробега, L^* - масштаб изменения макроскопических характеристик (характерный размер течения).
- Столкновения всех частиц являются бинарными, функции распределения для всех частиц f_k ($k=1, \dots, N$) мало отклоняются от равновесных максвелловских $f_k^{(0)}$, т.е. $f_k = f_k^{(0)}(1 + \varphi_k^{(1)})$, и уравнения Больцмана можно решать методом Чепмена-Энскога с разложением поправок к функциям распределения $\varphi_k^{(1)}$ по полиномам Сонина .
- Газ и плазма предполагаются термически равновесными, т.е. все степени свободы атомов, молекул, ионов и электронов (поступательные, вращательные, колебательные, электронные) имеют одну температуру T .
- Плазма является идеальной, т.е. внутри сферы с радиусом r_D находится много частиц, здесь r_D - дебаевский радиус экранирования,

$$r_D = \sqrt{\frac{kT}{4\pi n_e e^2}},$$

e - заряд электрона, n_e - числовая плотность электронов, k - постоянная Больцмана.

- Плазма является квазинейтральной, т.е. заряд смеси в целом равен нулю при усреднении по объему, много большему радиусу r_D .

- Внешнее магнитное поле отсутствует или является малым и не влияет на переносные свойства плазмы.
- Влиянием химических реакций и ионизации на коэффициенты переноса можно пренебречь, т.е. не учитывать "химические" неупругие столкновения, нарушающие равновесное распределение. Это соответствует предположению о том, что характерные времена всех реакций велики по сравнению со средним временем свободного пробега частиц, и скорости реакций много меньше, чем скорость установления максвелловского равновесия за счет упругих столкновений.

В работе представлены две формы записи уравнений переноса: классическая [2, 3] и новая, предложенная в работе [4]. Обе формы записи являются точными в том смысле, что они получены с помощью метода Чепмена-Энскога и справедливы в любом приближении ξ , где номер приближения ξ - число членов, учитываемых в разложениях по полиномам Сонина для возмущенных функций распределения.

В классической форме [2, 3] уравнения переноса записываются в виде, разрешенном относительно потоков, и приводят к выражениям для коэффициентов переноса, содержащим отношения определителей порядка $N\xi+1$ и $N\xi$, где N - число компонент. Новая форма записи уравнений переноса массы компонент и уравнения переноса энергии [4] приводит к более простым выражениям для соответствующих коэффициентов переноса, содержащим отношения определителей порядка $N(\xi-1)+1$ и $N(\xi-1)$, т.е. на N меньше, чем в традиционных формулах [2,3]. Кроме того, новая форма записи приводит к более простому выражению для истинного коэффициента теплопроводности смеси $\lambda(\xi)$, не использующему двойное обращение матриц, как в традиционной формулировке [2, 3]. Истинным коэффициентом теплопроводности называется коэффициент в выражении для теплового потока перед градиентом температуры, когда диффузионные потоки всех компонент равны нулю.

В работе приведены формулы для коэффициентов переноса, входящих в уравнения переноса, записанные как в традиционной форме [2,3], так и в новой форме [4]. Эти формулы справедливы для общего случая неравновесных химических реакций. Отдельно для случая химически равновесной смеси приведена компактная запись уравнений переноса и формулы для эффективных коэффициентов, учитывающих вклад равновесных химических реакций, с учетом высших приближений метода Чепмена-Энскога.

Численные расчеты коэффициентов переноса и эффективных коэффициентов проведены для воздуха, углекислого газа и аргона в широком диапазоне давления (0.0001 - 100 атм) и температуры (300 - 20 000 К) с учетом высших приближений, до четвертого приближения включительно. Показано, что для сильно ионизованной смеси погрешность вычисления коэффициентов переноса в первом ненулевом приближении метода Чепмена-Энскога достигает 50%.

Уравнения переноса массы, импульса, энергии; закон Ома

Законы сохранения массы, импульса и энергии для общего случая химически реагирующей неравновесной смеси газов или плазмы записываются в следующем виде.

Уравнение неразрывности (сохранения массы) для смеси в целом:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \vec{v}) = 0. \quad (1)$$

Уравнения сохранения массы базисных компонент - химических элементов и электронной компоненты:

$$\rho \frac{dc_j^*}{dt} + \operatorname{div} \vec{\mathbf{J}}_j^* = 0, \quad j = 1, \dots, L. \quad (2)$$

Уравнения сохранения массы компонент - продуктов реакций:

$$\rho \frac{dc_i}{dt} + \operatorname{div} \vec{\mathbf{J}}_i = \dot{w}_i, \quad i = L+1, \dots, N. \quad (3)$$

Уравнение сохранения импульса для смеси в целом:

$$\rho \frac{d\vec{v}}{dt} = \sum_{k=1}^N \rho_k \vec{\mathbf{F}}_k - \nabla P + \operatorname{div}(\hat{\tau}). \quad (4)$$

Уравнение сохранения энергии для смеси в целом:

$$\rho \frac{d}{dt} \left(h + \frac{v^2}{2} \right) = \frac{\partial P}{\partial t} + \sum_{k=1}^N \rho_k \vec{v}_k \vec{\mathbf{F}}_k + \operatorname{div}(\hat{\tau} \cdot \vec{v} - \vec{\mathbf{J}}_q). \quad (5)$$

Эту систему уравнений дополняют уравнение состояния идеального газа для смеси в целом

$$P = n k T \quad (6)$$

и следующие определения и соотношения:

$$\rho_k = n_k m_k, \quad \rho = \sum_{k=1}^N \rho_k = m \cdot n, \quad n = \sum_{k=1}^N n_k, \quad m = \sum_{k=1}^N x_k m_k, \quad \rho \vec{v} = \sum_{k=1}^N \rho_k \vec{v}_k, \quad (7)$$

где N - общее число компонент смеси, L - число независимых базисных компонент, за которые приняты химические элементы и электронная компонента, n_i , ρ_i , \vec{v}_i , $\vec{\mathbf{J}}_i$, \dot{w}_i , $\vec{\mathbf{F}}_i$ - число частиц в единице объема, массовая плотность, среднестатистическая скорость, массовый диффузионный поток i -й компоненты, скорость образования массы i -й компоненты в единице объема за единицу времени, массовая сила, действующая на i -ю компоненту; k - постоянная Больцмана; m_i - масса одной частицы i -й компоненты; m - средняя масса, приходящаяся на одну частицу смеси; n , \vec{v} , $\vec{\mathbf{J}}_q$, $\hat{\tau}$ - полное число частиц в единице объема, скорость, полный поток тепла, тензор вязких напряжений. Массовая концентрация c_j^* и диффузионный поток j -го элемента $\vec{\mathbf{J}}_j^*$ определяются соотношениями:

$$\begin{aligned} c_j^* &= c_j + \sum_{k=L+1}^N v_{kj} \frac{m_j}{m_k} c_k, & \sum_{j=1}^L c_j^* &= 1, \\ \vec{\mathbf{J}}_j^* &= \vec{\mathbf{J}}_j + \sum_{k=L+1}^N v_{kj} \frac{m_j}{m_k} \vec{\mathbf{J}}_k, & \sum_{j=1}^L \vec{\mathbf{J}}_j^* &= 0, \quad j = 1, \dots, L. \end{aligned} \quad (8)$$

Уравнения (1)-(5) получены в кинетической теории разреженных газов [1,2] и справедливы в любом приближении ξ . Для замыкания системы уравнений (1)-(8) используются уравнения переноса - выражения для "потоков" $\vec{\mathbf{J}}_j^*$, $j = 1, \dots, L$; $\vec{\mathbf{J}}_i$, $i = L+1, \dots, N$; $\vec{\mathbf{J}}_q$; $\hat{\tau}$; а также, в случае химически неравновесной смеси - выражение для источниковых членов \dot{w}_i , $i = L+1, \dots, N$.

Выражение для тензора вязких напряжений в пренебрежении коэффициентом объемной вязкости имеет вид [1]:

$$\tau_{\alpha\beta} = 2 \mu(\xi) e_{\alpha\beta} - \frac{2}{3} \mu(\xi) \delta_{\alpha\beta} \operatorname{div} \bar{\mathbf{v}}, \quad (9)$$

$$e_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial v_\beta}{\partial x_\alpha} \right), \quad \alpha, \beta = 1, 2, 3,$$

где $\tau_{\alpha\beta}$ - компоненты тензора вязких напряжений, $e_{\alpha\beta}$ - компоненты тензора скоростей деформации, $\mu(\xi)$ - коэффициент вязкости смеси в ξ -ом приближении метода Чепмена-Энскога.

Точные уравнения переноса массы компонент (соотношения Стефана-Максвелла) и точное выражение для потока тепла, справедливые в любом приближении ξ метода Чепмена-Энскога, были получены в работе [1] в традиционной форме. При этом соотношения Стефана-Максвелла записываются в виде, разрешенном относительно потоков - см. далее уравнения (26)-(28). В работе [4], также в рамках метода Чепмена-Энскога, уравнения переноса получены в модифицированном удобном виде, разрешенном относительно термодинамических "сил", что приводит к менее громоздким формулам для всех коэффициентов переноса, кроме вязкости (эти формулы приведены в следующем разделе). Уравнения переноса и соответствующие формулы для коэффициентов переноса, полученные в [4], также справедливы в любом приближении ξ и являются столь же точными, что и традиционные [1-3]. В данной работе коэффициенты переноса $\lambda^r(\xi)$, $\Delta_{ik}(\xi)$, $k_{Tk}(\xi)$ вычисляются по формулам [4], коэффициенты $D_{ik}(\xi)$, $D_{Tk}(\xi)$, $\sigma(\xi)$ - по формулам [1-3].

Следуя [4], соотношения Стефана-Максвелла для любого приближения ξ можно записать в виде, разрешенном относительно термодинамических "сил":

$$\bar{\mathbf{d}}_i = -\Delta_i \frac{\bar{\mathbf{J}}_i}{m_i} + x_i \sum_{k=1}^N \Delta_{ik}(\xi) \frac{\bar{\mathbf{J}}_k}{m_k}, \quad i=1, \dots, N, \quad (10)$$

где векторы диффузионных сил по определению равны

$$\bar{\mathbf{d}}_i = \nabla x_i + k_{P_i} \nabla \ln P + k_{T_i}(\xi) \nabla \ln T - \frac{c_i}{P} \left(\rho \bar{\mathbf{F}}_i - \sum_{k=1}^N \rho_k \bar{\mathbf{F}}_k \right), \quad i=1, \dots, N. \quad (11)$$

Здесь

$$\Delta_i = \sum_{k=1}^N x_k \Delta_{ik}, \quad k_{P_i} = x_i - c_i,$$

k_{P_i} - коэффициенты бародиффузии (не зависят от номера приближения), $k_{T_i}(\xi)$ - термодиффузионные отношения, $\Delta_{ik}(\xi)$ - диффузионные коэффициенты сопротивления.

Уравнения (10) можно преобразовать, выделяя базисные компоненты (индекс $j=1, \dots, L$) и компоненты - продукты реакций (индекс $i=L+1, \dots, N$):

$$\bar{\mathbf{d}}_j = -\Delta_j \frac{\bar{\mathbf{J}}_j^*}{m_j} + x_j \sum_{l=1}^L \Delta_{jl} \frac{\bar{\mathbf{J}}_l^*}{m_l} + \sum_{k=L+1}^N \theta_{kj}^* \frac{\bar{\mathbf{J}}_k}{m_k}, \quad j=1, \dots, L, \quad (12)$$

$$\bar{\mathbf{d}}_i = -\Delta_i \frac{\bar{\mathbf{J}}_i}{m_i} + x_i \sum_{l=1}^L \Delta_{il} \frac{\bar{\mathbf{J}}_l^*}{m_l} + \sum_{k=L+1}^N \theta_{ki}^{\circ} \frac{\bar{\mathbf{J}}_k}{m_k}, \quad i=L+1, \dots, N, \quad (13)$$

где

$$\theta_{kj}^* = \Delta_j v_{kj} + x_j \left(\Delta_{jk} - \sum_{l=1}^L v_{kl} \Delta_{lj} \right), \quad \theta_{ki}^{\circ} = x_i \left(\Delta_{ik} - \sum_{l=1}^L v_{kl} \Delta_{li} \right).$$

Для квазинейтральной частично ионизованной смеси газов соотношения Стефана-Максвелла можно далее преобразовать к следующему виду [4-7].

Уравнения диффузии элементов (базисных компонент):

$$\bar{\mathbf{d}}_j^* = \nabla c_j + K_{Pj}^* \nabla \ln P + K_{Tj}^* \nabla \ln T, \quad j=1, \dots, L, \quad (14)$$

$$\bar{\mathbf{d}}_j^* = -\frac{\Delta_j}{m} \bar{\mathbf{J}}_j^* + \frac{m_j}{m} \left(\sum_{l=1}^L \Delta_{jl}^* \frac{\bar{\mathbf{J}}_l^*}{m_l} + \sum_{k=L+1}^N \delta_{jk}^* \frac{\bar{\mathbf{J}}_k}{m_k} \right), \quad (15)$$

Уравнения диффузии для компонент - продуктов реакций:

$$\bar{\mathbf{d}}_i^{(0)} = \nabla c_i + K_{Pi}^{(0)} \nabla \ln P + K_{Ti}^{(0)} \nabla \ln T, \quad i=L+1, \dots, N, \quad (16)$$

$$\bar{\mathbf{d}}_i^{(0)} = -\frac{\Delta_i}{m} \bar{\mathbf{J}}_i + c_i \left(\sum_{l=1}^L \Delta_{il}^{(0)} \frac{\bar{\mathbf{J}}_l^*}{m_l} + \sum_{k=L+1}^N \Delta_{ik}^{(1)} \frac{\bar{\mathbf{J}}_k}{m_k} \right), \quad (17)$$

где

$$K_{Pi}^{(0)} = \frac{m_i}{m} k_{Pi} - c_i \sum_{s=1}^N \frac{m_s}{m} k_{Ps} - c_i \zeta_i^* \sum_{s=1}^N \zeta_s k_{Ps}, \quad K_{Ti}^{(0)} = \frac{m_i}{m} k_{Ti} - c_i \sum_{s=1}^N \frac{m_s}{m} k_{Ts} - c_i \zeta_i^* \sum_{s=1}^N \zeta_s k_{Ts}$$

$$K_{Pj}^* = K_{Pj}^{(0)} + \sum_{k=L+1}^N v_{kj} \frac{m_j}{m_k} K_{Pk}^{(0)}, \quad K_{Tj}^* = K_{Tj}^{(0)} + \sum_{k=L+1}^N v_{kj} \frac{m_j}{m_k} K_{Tk}^{(0)}$$

$$\zeta_i = e_i / \left(\sum_{k=1}^N x_k e_k^2 \right)^{1/2}, \quad \zeta_i^* = \zeta_i - \sum_{k=1}^N c_k \zeta_k,$$

$$\Delta_{ik}^{(0)} = \Delta_{ik} - \sum_{s=1}^N x_s \left(\frac{m_s}{m} - \frac{m_k}{m} \right) \Delta_{sk} + \zeta_i^* \sum_{r=1}^N x_r (\zeta_k - \zeta_r) \Delta_{rk}, \quad \Delta_{ik}^{(1)} = \Delta_{ik}^{(0)} - \sum_{l=1}^L v_{kl} \Delta_{il}^{(0)},$$

$$\Delta_{jl}^* = x_j \Delta_{jl}^{(0)} + \sum_{k=L+1}^N x_k v_{kj} \Delta_{kl}^{(0)}, \quad \delta_{jk}^* = v_{kj} (\Delta_j - \Delta_k) + \Delta_{jk}^* - \sum_{l=1}^L v_{kl} \Delta_{jl}^*,$$

e_i - заряд i -й компоненты.

Уравнение для полного потока тепла $\bar{\mathbf{J}}_q$ имеет вид:

$$\bar{\mathbf{J}}_q = \bar{\mathbf{q}} + \sum_{k=1}^N h_k \bar{\mathbf{J}}_k = \bar{\mathbf{q}} + \sum_{j=1}^L h_j \bar{\mathbf{J}}_j^* - \sum_{k=L+1}^N q_k \bar{\mathbf{J}}_k, \quad (18)$$

где $\bar{\mathbf{q}}$ - приведенный поток тепла, который в ξ -м приближении метода Чепмена-Энскога в представлении [4] выражается сразу через истинный коэффициент теплопроводности $\lambda(\xi)$ и термодиффузионные отношения $k_{Ti}(\xi)$:

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{q}} &= -\lambda(\xi) \nabla T + kT \sum_{k=1}^N \alpha_{Tk}(\xi) \frac{\bar{\mathbf{J}}_k}{m_k} = \\ &= -\lambda(\xi) \nabla T + kT \sum_{j=1}^L \alpha_{Tj}(\xi) \frac{\bar{\mathbf{J}}_j^*}{m_j} + kT \sum_{i=L+1}^N \beta_{Ti}(\xi) \frac{\bar{\mathbf{J}}_i}{m_i}, \\ \beta_{Ti} &= \alpha_{Ti} - \sum_{j=1}^L v_{ij} \alpha_{Tj}, \quad \alpha_{Ti} = \frac{1}{x_i} k_{Ti}. \end{aligned} \quad (19)$$

Подставляя выражение (19) для $\bar{\mathbf{q}}$ в первое уравнение (18), получаем:

$$\bar{\mathbf{J}}_q = -\lambda(\xi) \nabla T + kT \sum_{k=1}^N \alpha_{Tk}(\xi) \frac{\bar{\mathbf{J}}_k}{m_k} + \sum_{k=1}^N h_k \bar{\mathbf{J}}_k, \quad (20)$$

Преобразуя (20) с учетом выражений для энтальпий компонент - продуктов реакций через энтальпии базисных компонент и теплоты реакций

$$m_i h_i = \sum_{j=1}^L v_{ij} m_j h_j - m_i q_i, \quad i = L+1, \dots, N,$$

вводя диффузионные потоки элементов $\bar{\mathbf{J}}_j^*$ вместо $\bar{\mathbf{J}}_j, j=1, \dots, L$, получаем:

$$\bar{\mathbf{J}}_q = -\lambda \nabla T + \sum_{j=1}^L h_j^T \bar{\mathbf{J}}_j^* - \sum_{i=L+1}^N q_i^T \bar{\mathbf{J}}_i, \quad (21)$$

$$h_j^T = h_j + \frac{kT}{m_j} \alpha_{Tj}, \quad (22)$$

$$q_i^T = q_i - \frac{kT}{m_i} \left(\alpha_{Ti} - \sum_{j=1}^L v_{ij} \alpha_{Tj} \right). \quad (23)$$

Переходя в (21) от градиента температуры к градиенту энтальпии с использованием уравнения

$$\nabla h = c_p \nabla T + \sum_{j=1}^L h_j \nabla c_j^* - \sum_{i=L+1}^N q_i \nabla c_i, \quad (24)$$

получим выражение для полного потока тепла

$$\bar{\mathbf{J}}_q = -\frac{\mu}{Pr} \left[\nabla h - \sum_{j=1}^L \left(h_j \nabla c_j^* + \frac{Pr}{\mu} h_j^T \bar{\mathbf{J}}_j^* \right) + \sum_{i=L+1}^N \left(q_i \nabla c_i + \frac{Pr}{\mu} q_i^T \bar{\mathbf{J}}_i \right) \right], \quad (25)$$

где $Pr = Pr(\xi) = c_p \mu / \lambda$ - число Прандтля.

Уравнение (9) для тензора вязких напряжений совместно с соотношениями Стефана-Максвелла (уравнения (10)-(11) или (14)-(17)) и выражением для потока тепла (уравнения (18)-(19) или уравнение (25)) представляют полный набор уравнений переноса, достаточный для замыкания системы (1)-(8). Однако для полноты представления различных форм записи уравнений переноса в данной работе вычисляются также многокомпонентные коэффициенты диффузии D_{ik} и коэффициенты термодиффузии D_{Tk} , которые используются в традиционной форме записи уравнений переноса [1-3].

Далее приведены уравнения переноса массы компонент и выражение для потока тепла в традиционной форме. Соотношения Стефана-Максвелла в форме [1-3], разрешенные относительно потоков:

$$\bar{\mathbf{J}}_i = nm_i \sum_{k=1}^N D_{ik}(\xi) \frac{m_k}{m} \bar{\mathbf{d}}_k - D_{Ti}(\xi) \nabla \ln T, \quad i=1, \dots, N, \quad (26)$$

$$\bar{\mathbf{d}}_k = \nabla x_k + k_{Pk} \nabla \ln P - \frac{c_k}{P} \left(\rho \bar{\mathbf{F}}_k - \sum_{i=1}^N \rho_i \bar{\mathbf{F}}_i \right), \quad k=1, \dots, N. \quad (27)$$

Уравнение, определяющее приведенный поток тепла [1-3]:

$$\bar{\mathbf{q}} = -\lambda'(\xi) \nabla T - nkT \sum_{k=1}^N \frac{1}{n_k m_k} D_{Tk}(\xi) \bar{\mathbf{d}}_k. \quad (28)$$

Полный поток тепла $\bar{\mathbf{J}}_q$ по-прежнему определяется формулой (18). Векторы диффузионных сил $\bar{\mathbf{d}}_k$ в формулировке [1-3], входящие в (26) и (28), имеют несколько иной смысл, чем в формулировке [4], и определяются не уравнением (11), а уравнением (27), не содержащим термодиффузионного члена с градиентом температуры. Входящий в (28) коэффициент

$\lambda'(\xi)$ не является истинным коэффициентом теплопроводности. В формулировке [1-3] истинный коэффициент теплопроводности $\lambda(\xi)$ равен сумме $\lambda'(\xi)$ и термодиффузионного члена, который выражается с помощью весьма громоздких формул, требующих двойного обращения матриц порядка $N\xi$ и ξ . В данной работе коэффициент $\lambda'(\xi)$ не вычисляется, т.к. формулировка [4] приводит к прямому вычислению истинного коэффициента теплопроводности $\lambda(\xi)$ с помощью более простой формулы, представленной в следующем разделе.

При наличии в квазинейтральной плазме электрического тока, приведенные выше уравнения необходимо дополнить законом Ома, выражающим линейную связь плотности электрического тока в плазме \vec{j}_e и напряженности внешнего электрического поля \vec{E} :

$$\vec{j}_e = \sigma \vec{E} . \quad (29)$$

Формула для коэффициента электропроводности $\sigma = \sigma(\xi)$ представлена в следующем разделе. Уравнение (29) не учитывает влияния эффектов термо и бародиффузии, которые обычно предполагаются малыми. Обобщенный закон Ома, учитывающий эффекты термо и бародиффузии и влияние градиентов концентраций компонент, получен в работе [8].

Выражения для коэффициентов переноса

Формула для коэффициента вязкости в ξ -м приближении ($\xi \geq 1$) имеет вид [1-3]:

$$\mu(\xi) = -\frac{5}{2} \frac{1}{\det \|\hat{\mathbf{q}}\|} \left(\begin{array}{cccc|c} \hat{\mathbf{q}}_{rs}^{0,0} & \cdot & \cdot & \cdot & \hat{\mathbf{q}}_{rs}^{0,\xi-1} & x_r \sqrt{m_r} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \hat{\mathbf{q}}_{rs}^{\xi-1,0} & \cdot & \cdot & \cdot & \hat{\mathbf{q}}_{rs}^{\xi-1,\xi-1} & \cdot \\ \hline x_s \sqrt{m_s} & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \end{array} \right) , \quad (30)$$

$$\det \|\hat{\mathbf{q}}\| = \left| \begin{array}{cccc} \hat{\mathbf{q}}_{rs}^{0,0} & \cdot & \cdot & \cdot & \hat{\mathbf{q}}_{rs}^{0,\xi-1} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \hat{\mathbf{q}}_{rs}^{\xi-1,0} & \cdot & \cdot & \cdot & \hat{\mathbf{q}}_{rs}^{\xi-1,\xi-1} \end{array} \right| , \quad r,s=1,\dots,N,$$

здесь для каждой пары индексов m,p ($m,p=0,\dots,\xi-1$) $\hat{\mathbf{q}}_{rs}^{mp}$ - квадратная матрица порядка $N \times N$, составленная из элементов \hat{q}_{ij}^{mp} , $i,j=1,\dots,N$:

$$\begin{aligned} \bar{q}_{ij}^{mp} = & \sqrt{\frac{m_j}{2\pi kT}} \left\{ 8x_i \left(\frac{m_i}{m_j} \right)^{p+1} \times \sum_{k=1}^N x_k \sum_{l=1}^{m+1} [\delta_{ij} + (-1)^l \delta_{jk}] \times \right. \\ & \left. \times \sum_{t=0}^m \frac{(m_j/m_k)^{2t+[1-(-1)^l]J/2}}{(m_i/m_k+1)^{m+p+3/2}} \times \sum_{s=1}^{m+p+1-2t} b_{lts}^{m,p} \Omega_{ik}^{(l,s)} \right\}. \end{aligned} \quad (31)$$

Значения числовых коэффициентов $b_{lts}^{m,p}$ для $\xi=2$ приведены в [3,9].

Бинарные коэффициенты диффузии, входящие далее в формулы (34), (36), (39)-(40), вычисляются только в первом приближении:

$$\mathcal{D}_{ij} \equiv \mathcal{D}_{ij}(1) = \frac{3}{16n} \sqrt{\frac{2\pi kT}{m_{ij}}} \frac{1}{\Omega_{ij}^{(1,1)}}, \quad i,j=1,\dots,N, \quad (32)$$

где m_{ij} - приведенная масса,

$$m_{ij} = \frac{m_i m_j}{m_i + m_j}.$$

Для расчета коэффициента теплопроводности, термодиффузионных отношений и диффузионных коэффициентов сопротивления в ξ -м приближении использовались формулы, полученные в [4]. Формула для коэффициента транспортной теплопроводности в ξ -м приближении ($\xi \geq 2$) имеет вид [4]:

$$\lambda^{tr}(\xi) = -\frac{75}{8} \frac{k}{\det \|\mathbf{q}\|} \begin{vmatrix} 0 & x_s & 0 & \dots & 0 \\ x_r & \mathbf{q}_{rs}^{1,1} & \cdot & \cdot & \cdot & \mathbf{q}_{rs}^{1,\xi-1} \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \mathbf{q}_{rs}^{\xi-1,1} & \cdot & \cdot & \cdot & \mathbf{q}_{rs}^{\xi-1,\xi-1} \end{vmatrix}, \quad (33)$$

$$\det \|\mathbf{q}\| = \begin{vmatrix} \mathbf{q}_{rs}^{1,1} & \cdot & \cdot & \cdot & \mathbf{q}_{rs}^{1,\xi-1} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \mathbf{q}_{rs}^{\xi-1,1} & \cdot & \cdot & \cdot & \mathbf{q}_{rs}^{\xi-1,\xi-1} \end{vmatrix}, \quad r,s=1,\dots,N.$$

Коэффициент теплопроводности $\lambda^{tr}(\xi)$ учитывает перенос энергии только за счет поступательных степеней свободы частиц (транспортная теплопроводность). Дополнительный вклад в теплопроводность смеси за счет внутренних степеней свободы молекул λ^{int} вычисляется приближенно с помощью модифицированной формулы Эйкена [2,9]:

$$\lambda^{int} = \sum_{m=1}^{Nm} \lambda_m^{int} \times \left(1 + \sum_{\substack{k=1, \\ k \neq m}}^N \frac{x_k}{x_m} \frac{\mathcal{D}_{mm}}{\mathcal{D}_{mk}} \right)^{-1}, \quad (34)$$

$$\lambda_m^{int} = \lambda_m^{Euken} - \lambda_m^{tr}, \quad (35)$$

$$\lambda_m^{Euken} = 2.5 c_{V,m}^{tr} \mu_m + \rho c_{V,m}^{int} \mathcal{D}_{mm}, \quad (36)$$

где нижним индексом m , ($m=1, \dots, Nm$) обозначены молекулы, Nm - число молекул (без учета молекулярных ионов), индекс " k " относится ко всем компонентам смеси. В формулах (34)-(36) величины с нижним индексом " m " относятся к простому газу из молекул " m ": λ_m^{int} - дополнительный вклад в теплопроводность за счет внутренних степеней свободы, λ_m^{Euken} - значение полной теплопроводности, вычисленное по приближенной формуле Эйкена (36); $c_{V,m}^{tr}$ и $c_{V,m}^{int}$ - вклад в удельную теплоемкость при постоянном объеме за счет поступательного движения молекул " m " и за счет их внутренних степеней свободы; λ_m^{tr} , μ_m и \mathcal{D}_{mm} - транспортная теплопроводность, вязкость и коэффициент самодиффузии для простого газа, вычисленные в первом ненулевом приближении по точным формулам метода Чепмена-Энскога; \mathcal{D}_{mk} - бинарный коэффициент диффузии для смеси газов.

Полный коэффициент теплопроводности $\lambda(\xi)$ (далее - просто коэффициент теплопроводности) является суммой коэффициента транспортной теплопроводности $\lambda^{tr}(\xi)$ и поправки за счет вклада внутренних степеней свободы молекул λ^{int} :

$$\lambda(\xi) = \lambda^{tr}(\xi) + \lambda^{int}. \quad (37)$$

Формулы (34)-(36) - приближенные, в них учитываются только внутренние степени свободы молекул, а вклад в λ^{int} за счет возбуждения электронных уровней атомов и ионов не учитывается. Предполагается также, что коэффициенты диффузии молекул с возбужденными внутренними степенями свободы не отличаются от обычных коэффициентов диффузии. Использование простых приближенных формул (34)-(36) оправдано тем, что сама величина поправки λ^{int} невелика и существенна только в узком диапазоне температуры, где колебания молекул уже возбуждены, но молекулы еще не полностью диссоциированы.

Формула для термодиффузионных отношений в ξ -м приближении ($\xi \geq 2$) имеет вид [4]:

$$k_{Ti}(\xi) = -\frac{5}{2} \frac{1}{\det \|\mathbf{q}\|} \begin{vmatrix} 0 & x_s & 0 & \dots & 0 \\ \mathbf{q}_{ri}^{1,0} & \mathbf{q}_{rs}^{1,1} & \cdot & \cdot & \mathbf{q}_{rs}^{1,\xi-1} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \mathbf{q}_{ri}^{\xi-1,0} & \mathbf{q}_{rs}^{\xi-1,1} & \cdot & \cdot & \mathbf{q}_{rs}^{\xi-1,\xi-1} \end{vmatrix}, \quad i=1, \dots, N. \quad (38)$$

Диффузионные коэффициенты сопротивления в ξ -м приближении ($\xi \geq 2$) вычисляются с помощью поправочных функций $\varphi_{ij}(\xi)$ [4]:

$$\Delta_{ij}(\xi) = \Delta_{ij}(1) (1 + \varphi_{ij}(\xi)) = \frac{1 + \varphi_{ij}(\xi)}{n \mathcal{D}_{ij}(1)}, \quad i, j=1, \dots, N, \quad (39)$$

формула для поправочных функций $\varphi_{ij}(\xi)$ имеет вид:

$$\varphi_{ij}(\xi) = \frac{2}{3} \frac{\mathcal{D}_{ij}(1)}{x_i x_j} \frac{1}{\det \|\mathbf{q}\|} \begin{vmatrix} 0 & \mathbf{q}_{js}^{0,1} & 0 & \cdot & \cdot & \mathbf{q}_{js}^{0,\xi-1} \\ \mathbf{q}_{ri}^{1,0} & \mathbf{q}_{rs}^{1,1} & \cdot & \cdot & \cdot & \mathbf{q}_{rs}^{1,\xi-1} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \mathbf{q}_{ri}^{\xi-1,0} & \mathbf{q}_{rs}^{\xi-1,1} & \cdot & \cdot & \cdot & \mathbf{q}_{rs}^{\xi-1,\xi-1} \end{vmatrix}. \quad (40)$$

В первом приближении $\xi=1$:

$$\varphi_{ij}(1) = 0, \quad \Delta_{ij}(1) = \frac{1}{n \mathcal{D}_{ij}(1)}, \quad i, j = 1, \dots, N.$$

Входящие в формулы (33), (38), (40) матрицы \mathbf{q}_{rs}^{mp} ($m, p=0, \dots, \xi-1$) представляют квадратные матрицы порядка $N \times N$, составленные из элементов q_{ij}^{mp} ($i, j=1, \dots, N$). Выражения для q_{ij}^{mp} при $m > 0, p \geq m$ имеют вид:

$$q_{ij}^{mp} = \sqrt{\frac{m_j}{2\pi kT}} \left\{ 8x_i \left(\frac{m_i}{m_j} \right)^{p+1/2} \times \sum_{k=1}^N x_k \sum_{l=1}^{m+1} [\delta_{ij} + (-1)^l \delta_{jk}] \times \right. \\ \left. \times \sum_{t=0}^{m+1-l} \frac{(m_j/m_k)^{2t+l-1}}{(m_i/m_k + 1)^{m+p+1/2}} \times \sum_{s=l}^{m+p-(l-2)-2t} a_{lts}^{m,p} \Omega_{ik}^{(l,s)} \right\}. \quad (41)$$

Для $m=0, p > 0$:

$$q_{ij}^{0p} = \sqrt{\frac{m_j}{2\pi kT}} \left\{ 8x_i \left(\frac{m_i}{m_j} \right)^{p+1/2} \times \sum_{k=1}^N x_k \left(\frac{m_k}{m_i + m_k} \right)^{p+1/2} (\delta_{ij} - \delta_{jk}) \times \right. \\ \left. \times \sum_{s=1}^{p+1} a_{10s}^{0,p} \Omega_{ik}^{(1,s)} \right\}. \quad (42)$$

Для $p < m$:

$$q_{ij}^{mp} = \left(\frac{m_j}{m_i} \right)^{m-p} q_{ij}^{pm}. \quad (43)$$

Значения числовых коэффициентов $a_{lts}^{m,p}$ для всех m, p , необходимых при расчетах для $2 \leq \xi \leq 4$, приведены в [3,9].

Формулы (33), (38)-(40), полученные в представлении [4], более простые, чем приведенные далее формулы традиционного представления [1-3]. В частности, формулы (33), (38)-(40) содержат отношения определителей порядка $N(\xi-1)+1$ и $N(\xi-1)$, тогда как традиционные формулы (44), (45) содержат отношения определителей порядка $N\xi+1$ и $N\xi$, т.е. на N больше. Например, в случае смеси из $N=22$ компонент при $\xi=4$ формулы (33), (38)-(40) требуют расчета определителей порядка 67 и 66, а формулы (44), (45) - определителей порядка 89 и 88.

Далее приведены формулы для расчета коэффициентов термодиффузии $D_{Ti}(\xi)$ и многокомпонентных коэффициентов диффузии $D_{ik}(\xi)$, входящих в уравнения переноса (26)-(28) в традиционной форме [1-3].

Коэффициенты термодиффузии в ξ -м приближении ($\xi \geq 2$) вычисляются по формуле [3]:

$$D_{Ti}(\xi) = \frac{15 n_i \sqrt{2\pi m_i kT}}{4 \det \|\tilde{\mathbf{q}}\|} \begin{vmatrix} \tilde{\mathbf{q}}_{rs}^{0,0} & \tilde{\mathbf{q}}_{rs}^{0,1} & \dots & \tilde{\mathbf{q}}_{rs}^{0,\xi-1} & 0 \\ \tilde{\mathbf{q}}_{rs}^{1,0} & \tilde{\mathbf{q}}_{rs}^{1,1} & \dots & \tilde{\mathbf{q}}_{rs}^{1,\xi-1} & n_r \\ \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \tilde{\mathbf{q}}_{rs}^{\xi-1,0} & \tilde{\mathbf{q}}_{rs}^{\xi-1,1} & \dots & \tilde{\mathbf{q}}_{rs}^{\xi-1,\xi-1} & 0 \\ \hline \delta_{is} & 0 & \dots & 0 & 0 \end{vmatrix}, \quad (44)$$

$$\det \|\tilde{\mathbf{q}}\| = \begin{vmatrix} \tilde{\mathbf{q}}_{rs}^{0,0} & \tilde{\mathbf{q}}_{rs}^{0,1} & \dots & \tilde{\mathbf{q}}_{rs}^{0,\xi-1} \\ \tilde{\mathbf{q}}_{rs}^{1,0} & \tilde{\mathbf{q}}_{rs}^{1,1} & \dots & \tilde{\mathbf{q}}_{rs}^{1,\xi-1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \tilde{\mathbf{q}}_{rs}^{\xi-1,0} & \tilde{\mathbf{q}}_{rs}^{\xi-1,1} & \dots & \tilde{\mathbf{q}}_{rs}^{\xi-1,\xi-1} \end{vmatrix}, \quad i=1,\dots,N, \quad r,s=1,\dots,N.$$

Многокомпонентные коэффициенты диффузии в ξ -м приближении ($\xi \geq 1$) вычисляются по формуле [3]:

$$D_{ij}(\xi) = \frac{3mn_i \sqrt{2\pi kT}}{2m_j \sqrt{m_i} \det \|\tilde{\mathbf{q}}\|} \begin{vmatrix} \tilde{\mathbf{q}}_{rs}^{0,0} & \tilde{\mathbf{q}}_{rs}^{0,1} & \dots & \tilde{\mathbf{q}}_{rs}^{0,\xi-1} & \delta_{rj} - \delta_{ri} \\ \tilde{\mathbf{q}}_{rs}^{1,0} & \tilde{\mathbf{q}}_{rs}^{1,1} & \dots & \tilde{\mathbf{q}}_{rs}^{1,\xi-1} & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \tilde{\mathbf{q}}_{rs}^{\xi-1,0} & \tilde{\mathbf{q}}_{rs}^{\xi-1,1} & \dots & \tilde{\mathbf{q}}_{rs}^{\xi-1,\xi-1} & 0 \\ \hline \delta_{is} & 0 & \dots & 0 & 0 \end{vmatrix}, \quad (45)$$

$$i, j = 1, \dots, N, \quad r, s = 1, \dots, N.$$

Входящие в формулы (44)-(45) $\tilde{\mathbf{q}}_{rs}^{mp}$ ($m, p=0, \dots, \xi-1$) - квадратные матрицы порядка $N \times N$, составленные из элементов \tilde{q}_{ij}^{mp} ($i, j=1, \dots, N$), пропорциональных использованным выше элементам q_{ij}^{mp} :

$$\tilde{q}_{ij}^{mp} = q_{ij}^{mp} \times n \left(\frac{2\pi kT}{m_j} \right)^{1/2}. \quad (46)$$

Величины q_{ij}^{mp} определяются приведенными выше формулами (41)-(43). Кроме того, исходные формулы непосредственно для элементов \tilde{q}_{ij}^{mp} приведены в [3].

Коэффициент электропроводности плазмы выражается через сумму соответствующих коэффициентов многокомпонентной диффузии [3]:

$$\sigma(\xi) = \frac{e^2}{mkT} \sum_{\substack{i=1 \\ (i \neq e)}}^N n_i m_i Z_i D_{ei}(\xi), \quad (47)$$

где Z_i - зарядовое число соответствующей компоненты, т.е. $Z_i=0$ для молекул и атомов, $Z_i=1$ для однократных положительных ионов и $Z_i=2$ для двукратных положительных ионов; $D_{ei}(\xi)$ - коэффициент многокомпонентной диффузии для пары частиц "электрон - ион", i - индекс иона. Формула (47) получена в работе [3] в пренебрежении малыми членами порядка $\sqrt{m_e/m_a}$, где m_e и m_a - масса электрона и масса атома.

Отметим, что $\lambda^r(1) = k_{Ti}(1) = D_{Ti}(1) = 0$, т.е. для этих коэффициентов переноса первым ненулевым приближением является второе, $\xi=2$.

Эффективные коэффициенты переноса для равновесной смеси

Уравнения для полного потока тепла (20), (21), (25) справедливы для общего случая химически неравновесной смеси. Для химически равновесной смеси их можно упростить, используя уравнения Гульдберга-Вааге и Саха

$$\prod_{j=1}^L x_j^{v_{ij}} = x_i P^{-v_i} K_{pi}(T), \quad (48)$$

$$v_i = \sum_{j=1}^L v_{ij} - 1, \quad i=L+1, \dots, N,$$

и уравнения изохор Вант-Гоффа

$$\frac{d \ln K_{pi}}{dT} = \frac{m_i q_i}{R_A T^2}, \quad i = L+1, \dots, N, \quad (49)$$

где K_{pi} - константа равновесия реакции образования i -й компоненты. Следуя работам [5,7], используя (48), (49), можно получить систему линейных алгебраических уравнений относительно градиентов концентраций компонент - продуктов реакций ∇c_i , $i=L+1, \dots, N$, и решая эту систему, выразить сумму $q_i \nabla c_i$ в (25) через градиенты температуры, давления и концентраций элементов:

$$\sum_{i=L+1}^N q_i \nabla c_i = -c_{pr} \nabla T + \frac{a(v, q)}{\rho} \nabla P + \sum_{j=1}^L a_j(v^*, q) \nabla c_j^*. \quad (50)$$

Здесь c_{pr} - вклад в теплоемкость смеси при постоянном давлении за счет равновесных химических реакций, c_{pr} определяется через отношение определителей порядка $(R+1)$ и R , $R = (N - L)$ - число независимых химических реакций:

$$c_{pr} = - \frac{1}{m k T^2 \det \| \mathbf{a}_{ik} \|} \cdot \begin{vmatrix} \mathbf{a}_{ik} & \mathbf{m}_i \mathbf{q}_i \\ \mathbf{m}_k \mathbf{q}_k & 0 \end{vmatrix}. \quad (51)$$

Элементы матрицы \mathbf{a}_{ik} размерности $R \times R$ вычисляются через молярные концентрации и стехиометрические коэффициенты:

$$a_{ik} = \frac{\delta_{ik}}{x_i} - v_i v_k + \sum_{j=1}^L \frac{v_{ij} v_{kj}}{x_j}, \quad (52)$$

$$v_i = \sum_{j=1}^L v_{ij} - 1, \quad i, k = L+1, \dots, N,$$

Выражения для коэффициентов $a(v, q)$, $a_j(v^*, q)$ приведены в [5,7], δ_{ik} - символ Кронекера. Подставляя (50) в (24), получим выражение для градиента энтальпии в случае химически равновесной смеси:

$$\nabla h = c_{peff} \nabla T - \frac{a(v, q)}{\rho} \nabla P + \sum_{j=1}^L (h_j - a_j(v^*, q)) \nabla c_j^* , \quad (53)$$

$$c_{peff} = c_p + c_{pr} , \quad (54)$$

где c_{peff} - эффективная теплоемкость смеси при постоянном давлении с учетом вклада равновесных химических реакций. В уравнении (53) второй член справа учитывает эффект бародиффузии, третий член учитывает эффект "диффузии элементов", т.е. изменение элементного состава равновесной смеси за счет разных диффузионных свойств компонент.

Аналогично можно получить систему линейных алгебраических уравнений относительно диффузионных потоков компонент - продуктов реакций \vec{J}_i , $i=L+1, \dots, N$, и выразить сумму $q_i^T \vec{J}_i$ в (21), (25) через градиент температуры и диффузионные потоки элементов. В результате для химически равновесной смеси уравнения (21) и (25) преобразуются к виду (55) и (56), соответственно:

$$\vec{J}_q = -\lambda_{eff} \nabla T - \sum_{j=1}^L b_j^* \vec{J}_j^* , \quad (55)$$

$$\vec{J}_q = -\frac{\mu}{Pr_{eff}} \left[\nabla h + a(v, q) \frac{\nabla P}{\rho} + \sum_{j=1}^L \left(a_j^* \nabla c_j^* + \frac{Pr_{eff}}{\mu} b_j^* \vec{J}_j^* \right) \right]. \quad (56)$$

Входящие в эти уравнения эффективная теплопроводность λ_{eff} и эффективное число Прандтля Pr_{eff} определяются формулами:

$$\lambda_{eff}(\xi) = \lambda(\xi) + \lambda_r(\xi) = \lambda^{tr}(\xi) + \lambda^{int} + \lambda_r(\xi) , \quad (57)$$

$$Pr_{eff}(\xi) = \mu(\xi) c_{peff} / \lambda_{eff}(\xi) . \quad (58)$$

Вклад в теплопроводность смеси за счет равновесных реакций λ_r выражается через отношение определителей порядка $(R+1)$ и R , где R - число независимых химических реакций:

$$\lambda_r(\xi) = -\frac{1}{k T^2 \det \| \mathbf{b}_{ik} \|} \cdot \begin{vmatrix} \mathbf{b}_{ik} & \mathbf{m}_i \mathbf{q}_i^T \\ \mathbf{m}_k \mathbf{q}_k^T & 0 \end{vmatrix} . \quad (59)$$

Матрица \mathbf{b}_{ik} имеет размерность $R \times R$, ее элементы b_{ik} , $i, k=L+1, \dots, N$, вычисляются через молярные концентрации, стехиометрические коэффициенты и диффузионные коэффициенты сопротивления $\Delta_{ij}(\xi)$:

$$b_{ik} = \frac{\delta_{ik}}{x_i} \Delta_i - \Delta_{ik} + \sum_{j=1}^L \frac{v_{ij} v_{kj}}{x_j} \Delta_j - \sum_{j=1}^L \sum_{l=1}^L v_{ij} v_{kl} \Delta_{jl} + \sum_{j=1}^L (v_{ij} \Delta_{jk} + v_{kj} \Delta_{ji}) . \quad (60)$$

Матрица определителя $(R+1) \times (R+1)$, стоящего в числителе (59), получается из матрицы \mathbf{b}_{ik} добавлением столбца и строки, составленных из коэффициентов $m_i q_i^T$, выражающихся через молярные теплоты реакций и термодиффузионные факторы α_{Ti} согласно формуле (23). Коэффициенты $a_j^* = a_j(v^*, q) - h_j$; выражения для коэффициентов b_j^* приведены в [7].

В уравнениях (53), (55)-(56) члены, пропорциональные ∇P , градиентам концентраций элементов ∇c_j^* и диффузионным потокам элементов \vec{J}_j^* , учитывают бародиффузию и влияние переменности элементного состава - эффект диффузии элементов. В практических приложе

ниях влиянием этих эффектов как правило пренебрегают и коэффициенты $a(v, q)$, a_j^* , b_j^* не вычисляют. В этом случае уравнения (53), (55)-(56) принимают простой вид:

$$\nabla h = c_{peff} \nabla T, \quad \bar{\mathbf{J}}_q = -\lambda_{eff} \nabla T, \quad \bar{\mathbf{J}}_q = -\frac{\mu}{Pr_{eff}} \nabla h.$$

В точной постановке с учетом бародиффузии и диффузии элементов в химически равновесной смеси уравнения (53), (55)-(56) должны быть дополнены уравнениями (2) и следующими соотношениями Стефана-Максвелла для диффузии элементов [7,10]:

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{d}}_j^* &= \nabla c_j^* + K_{Pj}^* \nabla \ln P + \left(K_{Tj}^* - \frac{m_j}{m} \delta_j^{(e)} \right) \nabla \ln T, \\ \bar{\mathbf{d}}_j^* &= -\frac{\Delta_j}{m} \bar{\mathbf{J}}_j^* + \frac{m_j \Delta_j}{m} \sum_{l=1}^L \alpha_{jl}^{(e)} \frac{\bar{\mathbf{J}}_l^*}{m_l}, \quad j=1, \dots, L, \end{aligned} \quad (61)$$

Система уравнений (2), (61), описывающих диффузию элементов в химически равновесной смеси, существенно упрощается для двухэлементной смеси, т.е. смеси, образованной из двух химических элементов и, при наличии ионизации, электронной компоненты. Примерами двухэлементных смесей являются воздух (элементы O и N, в пренебрежении аргоном), углекислый газ (элементы C и O), водородо-гелевая смесь. Для химически равновесной двухэлементной смеси ионизированных газов ($L=3$) в предположении квазинейтральности и отсутствия электрического тока система уравнений (2), (61) упрощается и сводится к одному уравнению:

$$\bar{\mathbf{J}}_\alpha^* = -\bar{\mathbf{J}}_\beta^* = -\frac{\mu}{S_\alpha^*} \left(\nabla c_\alpha^* + K_{P\alpha}^* \nabla \ln P + \left(K_{T\alpha}^* - \frac{m_j}{m} \delta_\alpha^{(e)} \right) \nabla \ln T \right) \quad (62)$$

где α и β - индексы двух химических элементов, из которых состоят компоненты смеси.

Коэффициенты, входящие в уравнения (53), (55)-(56), (62) были вычислены в работе [10] для равновесной воздушной плазмы, рассматриваемой как двухэлементная смесь (без аргона). В работе [11] проведены расчеты равновесного течения частично ионизованного воздуха в вязком ударном слое с точным учетом термодиффузии и диффузии элементов с использованием уравнений (53), (56), (62). Показано, что изменение элементного состава внутри пограничного слоя может быть значительным ($c_{Omin}^* \approx 0.15$, $c_{Omax}^* \approx 0.3$ при стандартном значении $c_O^* = 0.23$), однако влияние диффузии элементов и термодиффузии на тепловой поток к холодной стенке составляет не более 3÷4%.

Недавно появились работы [12-13], посвященные исследованию влияния диффузии элементов. В [12] численно исследуется течение в пограничном слое на линии торможения перед моделью, испытываемой в струе диссоциированного воздуха или углекислого газа. В работе [13] на основе уравнений Навье-Стокса были проведены расчеты течений воздушной плазмы в разрядном канале индукционного плазмотрона и было показано, что изменение элементного состава смеси может превышать 0.1. Отметим, что в этих работах для описания диффузии элементов в равновесной квазинейтральной смеси использовалась система уравнений, а не одно уравнение типа (62), хотя рассматривалась двухэлементная смесь, причем без учета термо и баро-диффузии.

Вычисление интегралов столкновений

Интегралы столкновений $\Omega_{ij}^{(l,s)}$ определяются по сечениям рассеяния $Q_{ij}^{(l)}$ согласно формуле [3]:

$$\Omega_{ij}^{(l,s)} = \frac{4(l+1)}{(s+1)! [2l+1-(-1)^l]} \int_0^\infty e^{-\gamma^2} \gamma^{2s+3} Q_{ij}^{(l)}(g) d\gamma, \quad (63)$$

здесь i, j - индексы сталкивающихся частиц, верхние индексы (l,s) обозначают порядок интеграла, g - начальная относительная скорость, γ - приведенная начальная относительная скорость сталкивающихся частиц, связанная с g и с приведенной массой сталкивающихся частиц m_{ij} :

$$\gamma = g \sqrt{\frac{m_{ij}}{2kT}}, \quad m_{ij} = \frac{m_i m_j}{m_i + m_j}.$$

Сечения рассеяния $Q_{ij}^{(l)}$ можно вычислить по заданному потенциалу взаимодействия частиц $V_{ij}(r)$:

$$Q_{ij}^{(l)}(g) = 2\pi \int_0^\infty (1 - \cos^l \chi_{ij}) b db,$$

$$\chi_{ij}(b, g) = \pi - 2b \int_{r_m}^\infty \frac{dr/r^2}{\sqrt{1 - \frac{2V_{ij}(r)}{m_{ij} g^2} - \frac{b^2}{r^2}}},$$

где b - прицельное расстояние, χ - угол отклонения частиц в системе координат центра тяжести, r - расстояние между частицами, r_m - расстояние наименьшего сближения. Размерность интегралов столкновений $\Omega_{ij}^{(l,s)} - A^2$, потенциалов взаимодействия $V_{ij}(r)$ - эВ. Для расчета коэффициентов переноса в 4-м приближении для каждой пары компонент необходимо использовать шестнадцать интегралов столкновений $\Omega_{ij}^{(l,s)}$: $1 \leq l \leq 4$; $s = l, l+1, \dots, 8-l$.

Используемые модели потенциалов взаимодействия

Для всех видов сталкивающихся частиц их взаимодействие и потенциал V зависят в основном от расстояния r между ними. На малых расстояниях действуют силы отталкивания, определяющиеся обменным взаимодействием электронов, экспоненциально убывающим с расстоянием, и кулоновским взаимодействием. Эти короткодействующие силы существенны при больших температурах. Взаимодействие частиц на малых расстояниях моделируется потенциалом Борна-Майера:

$$V(r) = A \exp(-\alpha \cdot r). \quad (64)$$

На больших расстояниях, когда перекрытие электронных оболочек сталкивающихся частиц отсутствует, взаимодействие частиц определяется дальнедействующими силами типа электростатического, индукционного и дисперсного взаимодействия. Эти силы являются основными при расчете коэффициентов переноса для малых и умеренных температур порядка 1000 К и ниже. Потенциал взаимодействия для дальнедействующих сил между нейтральными компонентами (молекула-молекула, молекула-атом) можно моделировать комбинациями обратных степенных зависимостей. Простейшая модель такого типа - потенциал Леннарда-Джонса:

$$V(r) = \varepsilon \cdot \left(\left(r_m / r \right)^{12} - \left(r_m / r \right)^6 \right), \quad (65)$$

используемый для описания взаимодействия молекул при малых температурах [1]. Более широкую область применимости имеет потенциал, предложенный в [14-16]:

$$V(r) = \varepsilon \cdot (r_m/r)^n - b \cdot (r_m/r)^6 - c \cdot (r_m/r)^8, \quad (66)$$

где первый член введен для удобства последующей сшивки с потенциалом короткодействующих сил отталкивания. На промежуточных расстояниях взаимодействие частиц определяется конкуренцией дальнедействующих и короткодействующих сил. Для описания взаимодействия частиц в широком диапазоне расстояний, включая промежуточную область, т.е. с учетом короткодействующих и дальнедействующих сил, в [14-16] предложен универсальный потенциал, полученный с помощью гладкой сшивки потенциала отталкивания (64) и потенциала дальнедействующих сил (66):

$$V(r) = \begin{cases} A \exp(-\alpha \cdot r), & r \leq r_1 \\ S(r), & r_1 < r < r_2 \\ \varepsilon \cdot (r_m/r)^n - b \cdot (r_m/r)^6 - c \cdot (r_m/r)^8, & r \geq r_2 \end{cases}, \quad (67)$$

где $S(r)$ - кубический сплайн, обеспечивающий гладкую интерполяцию между потенциалом Борна-Майера и потенциалом дальнедействующих сил притяжения.

При взаимодействии сложных частиц (двух молекул, молекулы с атомом или с ионом) потенциал зависит также от углов взаимной ориентации частиц. В этом случае для расчета коэффициентов переноса используют эффективный потенциал, усредненный по углам ориентации.

Взаимодействие заряженных частиц в термически равновесной идеальной плазме достаточно точно описывается экранированным кулоновским потенциалом [2]:

$$V(r) = \frac{e^2 Z_i Z_j}{r} \exp(-r/r_D) = kT \frac{E_{ij}}{r} \exp(-r/r_D), \quad (68)$$

где e - заряд электрона, Z_i - зарядовое число i -й компоненты, которое может быть положительным (ион) и отрицательным (электрон). Дебаевский радиус экранирования r_D и длина Ландау E_{ij} определяются формулами:

$$r_D = \sqrt{\frac{kT}{4\pi n_e e^2}}, \quad E_{ij} = \frac{e^2 Z_i Z_j}{kT}. \quad (69)$$

Расчет потенциала взаимодействия, даже с использованием различных приближений, является весьма сложной задачей и возможен только для относительно простых случаев (например, расчет параметров потенциала Борна-Майера для атом-атомных взаимодействий [17]). Параметры заданной модели потенциала взаимодействия или сечения рассеяния могут быть получены (восстановлены) с помощью результатов экспериментальных исследований рассеяния пучков; например, сечения рассеяния для взаимодействий электрон-атом и электрон-молекула получены в [18,19]. Используются также и другие экспериментальные данные - исследование подвижности ионов в электрическом поле, спектроскопические данные и др. Если для нужного вида взаимодействия сложных частиц (молекул, ионов) отсутствуют надежные экспериментальные и теоретические данные, потенциал взаимодействия можно сконструировать с помощью эмпирических методов, например метода атом-атомных потенциалов [14-16], использующего сумму потенциалов взаимодействия отдельных атомов, составляющих сложную частицу.

В работах [14-16,20-23] проведен анализ имеющихся экспериментальных и теоретических данных по сечениям столкновений и потенциалам взаимодействия, выбраны наиболее досто

верные данные и модели для всех видов взаимодействия и проведены расчеты интегралов столкновений всех необходимых порядков, если для них в литературе отсутствовали данные. На основе этих работ создана база данных, реализованная в виде набора подпрограмм, позволяющих вычислить все интегралы столкновений, необходимые для расчета коэффициентов переноса в высших приближениях до 4-го приближения включительно. Расчет по этим подпрограммам использует готовые аппроксимационные формулы, определяющие $\Omega_{ij}^{(l,s)}$ как функции температуры, или интерполяцию по рассчитанным ранее таблицам.

Далее представлены модели потенциалов взаимодействия и формулы, аппроксимирующие интегралы столкновений для основных типов взаимодействий.

Интегралы столкновений нейтральных частиц

Столкновения пар частиц типа молекула-молекула, молекула-атом описываются универсальным потенциалом (67). Для пар этого типа параметры A и α потенциала Борна-Майера, входящего в (67), определялись методом атом-атомных взаимодействий, исходя из значений A и α для взаимодействий атом-атом, рассчитанных в [17], и экспериментальных данных. Параметры потенциала (66), описывающего дальнедействующие силы в (67), определялись с помощью различных экспериментальных данных. Параметры универсального потенциала (67) для основных пар типа молекула-молекула, молекула-атом приведены в [14,15]. Интегралы столкновений как функции температуры для потенциала (67) рассчитаны и представлены в виде таблиц [14,15]; при расчете коэффициентов переноса значения этих интегралов столкновений определялись с помощью интерполяции.

Влияние столкновений типа атом-атом на коэффициенты переноса существенно только при высоких температурах, когда дальнедействующей составляющей потенциала взаимодействия можно пренебречь. Поэтому эти столкновения с достаточной точностью описываются потенциалом Борна-Майера (64). Для всех пар атомов параметры A и α , определенные на основе расчета [17], приведены в работах [14-16,21]. Все необходимые интегралы $\Omega_{ij}^{(l,s)}$ для потенциала Борна-Майера аппроксимировались простыми зависимостями. При этом интеграл $\Omega_{ij}^{(1,1)}$ использовался в качестве базового - он аппроксимировался непосредственно следующим выражением:

$$\Omega_{ij}^{(1,1)}(T) = \frac{1.827}{\alpha_{ij}^2} \cdot \eta^{2.2405} \exp(-0.01337 \cdot \eta), \quad \eta \equiv \ln(A_{ij}/kT). \quad (70)$$

Все остальные интегралы столкновений $\Omega_{ij}^{(l,s)}$ выражаются через безразмерные относительные интегралы $\omega_{ij}^{(l,s)} = \Omega_{ij}^{(l,s)}/\Omega_{ij}^{(1,1)}$, которые аппроксимируются более простыми зависимостями вида

$$\omega_{ij}^{(l,s)} = \begin{cases} a_0^{(l,s)} + a_1^{(l,s)}\eta + a_2^{(l,s)}\eta^2; & \eta \leq \eta_*^{(l,s)} \\ b_0^{(l,s)} + b_1^{(l,s)} \ln \eta; & \eta > \eta_*^{(l,s)} \end{cases} \quad (71)$$

Значения коэффициентов для этих аппроксимаций приведены в [16,21].

Интегралы столкновений нейтральных частиц с ионами

Взаимодействие при упругих (нерезонансных) столкновениях на близких расстояниях описывается потенциалом Борна-Майера. Возникающее на дальних расстояниях поляризационное взаимодействие и другие дальнедействующие силы существенны только при небольших температурах меньше 1000÷2000 К, но при этих температурах концентрации ионов в равновесной смеси малы. Поэтому для расчета коэффициентов переноса равновесной плазмы с

достаточной точностью можно пренебречь влиянием дальнедействующих сил и использовать потенциал Борна-Майера формально для всех расстояний. Значения параметров A и α определялись с помощью метода атом-атомных потенциалов и дополнительно корректировались для лучшего соответствия экспериментальным данным для тех пар нейтрал-ион, для которых в литературе известны надежные экспериментальных данные. Полученные в результате параметры A и α для всех пар нейтрал-ион приведены в [14-16]. Интегралы столкновений рассчитываются по формулам (70)-(71).

Резонансная перезарядка

Столкновения нейтрала с одноименным ионом, в отличие от рассмотренного выше упругого рассеяния, сопровождаются резонансной перезарядкой - передачей заряда от иона к нейтралу без энергообмена. Этот эффект приводит к резкому возрастанию сечения столкновения для нечетных номеров l ($l=1$ и $l=3$). Для четных номеров l ($l=2$ и $l=4$) этот эффект не проявляется и интегралы $\Omega_{ij}^{(l,s)}(T)$ рассчитываются с учетом только упругого рассеяния с использованием потенциала Борна-Майера.

Интегралы столкновений для резонансной перезарядки рассчитываются по соответствующим сечениям резонансного обмена, полученным из экспериментальных данных по рассеянию пучков и по подвижности ионов в электрическом поле. В некоторых случаях используют результаты квантово-механических расчетов и других расчетных методов. Обзор различных методик и данных по сечениям резонансного обмена приведен в [14,23]. Полученные в результате интегралы столкновений резонансной перезарядки аппроксимированы как функции температуры. Для базового интеграла $\Omega_{ij}^{(1,1)}$ использовалась аппроксимация

$$\Omega_{ij}^{(1,1)}(T) = a_{ij} + b_{ij} \lg(T) + c_{ij} \lg^2(T). \quad (72)$$

Относительные интегралы $\omega_{ij}^{(l,s)}$ для резонансной перезарядки слабо зависят от температуры и могут быть аппроксимированы константами:

$$\omega_{ij}^{(l,s)}(T) = \omega_{ij}^{(l,s)}. \quad (73)$$

Коэффициенты в формуле (72) и значения $\omega_{ij}^{(l,s)}$ ($l=1$ и $l=3$) для всех пар атом - ион и молекула - молекулярный ион приведены в [16]; значения $\omega_{ij}^{(l,s)}$ близки к единице.

Интегралы столкновений нейтральных частиц с электронами

Интегралы столкновений атомов и молекул с электронами были рассчитаны по сечениям рассеяния, полученным в работах [18,19]. Базовые интегралы $\Omega_{ej}^{(1,1)}$, рассчитанные как функции температуры, представлены в виде таблиц. Относительные интегралы $\omega_{ej}^{(l,s)}(T)$ аппроксимированы простыми формулами [16]. Отметим, что столкновения молекул с электронами существенны только в узком диапазоне температуры, где молекулы еще не полностью диссоциированы, но уже начинается ионизация газа.

Интегралы столкновений заряженных частиц

Взаимодействие заряженных частиц описывается экранированным кулоновским потенциалом (68). Интегралы столкновений для него рассчитаны в [20] отдельно для двух случаев: столкновения одноименно и разноименно заряженных частиц, соответствующие интегралы обозначаются $\Omega_{++}^{(l,s)}$ и $\Omega_{+-}^{(l,s)}$. В работах [14,21] получены аппроксимационные формулы для этих интегралов в диапазоне $0.1 < \Lambda \leq 100$:

$$\Omega_{++}^{(1,1)} = \pi E_{ij}^2 \cdot (0.5228 \cdot \ln(1 + 0.6\Lambda)), \quad z_i z_j > 0, \quad (74)$$

Большой разброс расчетных данных разных авторов объясняется использованием различных потенциалов взаимодействия и интегралов столкновений, а также тем, что в большинстве работ расчеты проводились только в первом ненулевом приближении. Надежные экспериментальные данные по μ и λ имеются только в области низких температур, до 2000÷2500 К. В области высоких температур экспериментальных данных по μ , σ , λ_{eff} мало и они носят противоречивый характер. Возможные причины расхождения различных экспериментальных данных при высоких температурах указаны в [30,31]. Результаты наших расчетов коэффициентов переноса согласуются с известными данными [32-35] при низких температурах и с данными [36] - при высоких температурах.

Далее приведены некоторые результаты наших расчетов.

Численное исследование сходимости коэффициентов переноса с увеличением номера приближения ξ показало, что точность порядка 1% во всем рассматриваемом диапазоне температур обеспечивается при расчете вязкости во втором приближении $\mu(2)$, а для остальных коэффициентов переноса - в 3-м ненулевом приближении, что соответствует обычным приближениям $\xi_\lambda = 4$, $\xi_{k_T} = 4$, $\xi_\Delta = 3$, $\xi_\sigma = 3$. Многие коэффициенты переноса с достаточной точностью рассчитываются уже во втором ненулевом приближении, например, для воздуха точность ~1÷3% имеют величины $\lambda(3)$, $\Delta_{ij}(2)$, $\sigma(2)$. Расчет коэффициентов переноса в первом ненулевом приближении может привести к значительной погрешности, например, для ионизованного воздуха погрешность значений $\mu(1)$, $\sigma(1)$, $\lambda(2)$ может достигать порядка 15%, 40% и 50% соответственно. В качестве примеров расчетов на рис. 1 и 2 показана сходимость коэффициентов переноса воздушной плазмы - вязкости $\mu(\xi)$, $1 \leq \xi_\mu \leq 2$, и электропроводности $\sigma(\xi)$, $1 \leq \xi_\sigma \leq 3$, для давления $P=1$ атм. На рис. 3 - 4 показаны коэффициенты переноса - вязкость $\mu(2)$ и электропроводность $\sigma(3)$, рассчитанные для воздуха, углекислого газа и аргона при $P=1$ атм. Расчеты этих коэффициентов проведены в приближениях $\xi_\mu = 2$, $\xi_\sigma = 3$.

Эффективные коэффициенты переноса Pr_{eff} , λ_{eff} , λ_T зависят от номера приближения ξ , т.к. они зависят от вязкости (Pr_{eff}), от теплопроводности, от термодиффузионных отношений через $m_i q_i^T$ (23) и от диффузионных коэффициентов сопротивления через b_{ik} (60). Если разные коэффициенты переноса (μ , λ , k_{Ti} , Δ_{ik}) вычисляются в разных приближениях, то эффективные коэффициенты переноса могут зависеть сразу от нескольких номеров приближений, т.е. от "вектора" $\Sigma = (\xi_\mu, \xi_\lambda, \xi_{k_T}, \xi_\Delta)$. Сходимость эффективных коэффициентов переноса при увеличении Σ была исследована численно в диапазоне от первого ненулевого приближения $\Sigma = (1, 2, 1, 1)$ до $\Sigma = (2, 4, 4, 4)$. Было показано, что расчет эффективных коэффициентов в первом ненулевом приближении $\Sigma = (1, 2, 1, 1)$ приводит к значительной погрешности (более 50%) в области, где существенна ионизация. Достаточную точность не хуже 5% для всех эффективных коэффициентов обеспечивает расчет в приближении $\Sigma = (2, 3, 2, 2)$. Показано также, что влияние на эффективные коэффициенты термодиффузионных отношений k_{Ti} и поправок ϕ_{ik} к диффузионным коэффициентам сопротивления невелико. Например, влияние k_{Ti} и ϕ_{ik} на реакционную теплопроводность λ_T не превышает 5% и 2% соответственно, поэтому с указанной точностью можно считать, что λ_T зависит только от ξ_λ .

На рис. 5 для равновесной плазмы воздуха при $P=1$ атм показана сходимость транспортной теплопроводности $\lambda^T(\xi)$, $2 \leq \xi_\lambda \leq 4$, и эффективной теплопроводности $\lambda_{\text{eff}}(\Sigma)$, $\Sigma=(2,1,1)$, $(3,1,1)$ и $(4,4,4)$, где $\Sigma = (\xi_\lambda, \xi_{k_T}, \xi_\Delta)$. Первое ненулевое приближение для $\lambda_{\text{eff}}(\Sigma)$, $\Sigma=(2,1,1)$,

дает значительную погрешность, достигающую 45%. Расчет $\lambda_{eff}(\Sigma)$ в приближении $\Sigma=(3,1,1)$, т.е. с учетом второго ненулевого приближения для λ^r , первого приближения для Δ_{ik} и без учета термодиффузии, дает достаточно точное значение, отличающееся от расчета в высшем приближении $\Sigma=(4,4,4)$ не более чем на 4%. Таким образом, эффективная теплопроводность воздуха слабо зависит от учета термодиффузии и поправок ϕ_{ik} к диффузионным коэффициентам сопротивления Δ_{ik} : практически совпадают значения $\lambda_{eff}(\Sigma)$, рассчитанные для $\Sigma=(2,1,1)$ и $\Sigma=(2,2,2)$, а также для $\Sigma=(3,1,1)$ и $\Sigma=(3,3,3)$.

На рис. 6 показана эффективная теплопроводность $\lambda_{eff}(\Sigma)$, рассчитанная для воздуха, углекислого газа и аргона при $P=1$ атм. Расчеты проведены в высших приближениях $\Sigma = (\xi_\lambda, \xi_{k_r}, \xi_\Delta) = (4, 4, 4)$.

Литература

1. Гиршфельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей. М.: ИЛ. 1963.
2. Ферцигер Дж., Капер Г. Математическая теория процессов переноса в газах. - М.: Мир, 1976.
3. Devoto R.S. Transport properties of ionized monoatomic gases. Physics of Fluids, 1966, v.9, N.6, pp.1230-1240.
4. Колесников А.Ф., Тирский Г.А. Уравнения гидродинамики для частично ионизованных многокомпонентных смесей газов с коэффициентами переноса в высших приближениях. В сб.: Молекулярная газодинамика. - М.: Наука. 1982. с.20-44.
5. Суслов О.Н., Тирский Г.А., Щенников В.В. Описание химически равновесных течений многокомпонентных ионизованных смесей в рамках уравнений Навье-Стокса и Прандтля. Журнал Прикладной Механики и Технической Физики. 1971. №1. с.73-89.
6. Васильевский С.А., Соколова И.А., Тирский Г.А. Точные уравнения и коэффициенты переноса для многокомпонентной смеси газов и частично ионизованной плазмы. Журнал прикладной механики и технической физики. 1984. №4. с. 15-24.
7. Васильевский С.А., Соколова И.А., Тирский Г.А. Определение и вычисление эффективных коэффициентов переноса для химически равновесных течений частично диссоциированных и ионизованных смесей газов. Журнал Прикладной Механики и Технической Физики. 1986. №1. с.68-79.
8. Соколова И.А., Тирский Г.А. Обобщенный закон Ома частично ионизованных многокомпонентных смесей химически реагирующих газов. В сб.: Избранные вопросы современной механики, ч.1. - М.: Изд-во МГУ. 1981. с. 91-109
9. Соколова И.А. Свойства молекулярного переноса в задачах теплообмена и газовой динамики. Обзоры по теплофизическим свойствам веществ / ТФЦ. - М.: ИВТАН. 1992, № 2 (94).
10. Васильевский С.А., Ефимова Л.Г., Колесников А.Ф., Соколова И.А., Тирский Г.А. Расчет коэффициентов переноса в многокомпонентной плазме в высших приближениях. Эффект разделения элементов в химически и ионизационно равновесной плазме. Отчет № 2427 Института механики МГУ. М, 1980.
11. Васильевский С.А. Расчет течения и теплопередачи в окрестности оси симметрии затупленного тела с учетом диффузии элементов и высших приближений для коэффициентов переноса. В сб.: Современные газодинамические и физико-химические модели гиперзву

- ковой аэродинамики и теплообмена. ч.1. / Ред. Л.И.Седова М., Издательство МГУ, 1994. с.30-44.
12. Rini, P. and Degrez, G. Elemental demixing in air and carbon dioxide stagnation line flows. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, vol. 18, No. 4, 2004, pp. 511-518.
 13. P. Rini, D. Vanden Abeele and G. Degrez. Elemental demixing in inductively coupled air plasmas at high pressures. *AIAA Paper 2004-2461*.
 14. Гордеев О.А., Калинин А.П., Комов А.Л., Люстерник В.Е., Самуйлов Е.В., Соколова И.А., Фокин Л.Р. Потенциалы взаимодействия, упругие сечения, интегралы столкновений компонентов воздуха для температур до 20000 К. Обзоры по теплофизическим свойствам веществ / ТФЦ. - М.: ИВТАН. 1985, № 5 (55).
 15. Герасимов Г.Я., Калинин А.П., Люстерник В.Е., Самуйлов Е.В., Соколова И.А., Фокин Л.Р., Цителаури Н.Н., Щевелева Н.А. Интегралы столкновений, потенциалы атом-молекулярных и ион-молекулярных взаимодействий компонентов воздуха до 20000 К. Обзоры по теплофизическим свойствам веществ / ТФЦ. - М.: ИВТАН. 1987, № 5 (67).
 16. Соколова И.А. Моделирование молекулярного переноса многокомпонентных газов и плазмы. Диссертация на соискание ученой степени доктора физико-математических наук. М., Институт математического моделирования РАН, 1992.
 17. Gaydaenko V.I., Nikulin V.K. Born-Mayer interatomic potentials for atoms with $Z=2$ to $Z=36$. *Chem. Phys. Lett.* 1970. v.7, N3, pp.360-362.
 18. Itikawa J. Momentum transfer cross sections for electron collisions with atoms and molecules revision and supplement. *Atomic data and nuclear data tables*, 1978, v.21, N 1, p.69-75.
 19. Hayashi M. Recommended values of transport cross sections for elastic collisions and total collision cross section for electrons in atomic and molecular gases. Report IPPJ AM. 1981.
 20. Соколова И.А. Коэффициенты переноса и интегралы столкновений воздуха и его компонент. В сб.: Физическая кинетика. ИТПМ СО АН СССР: Новосибирск, 1974, с.39-104.
 21. Соколова И.А., Тирский Г.А. Расчет и аппроксимации интегралов столкновений компонентов смесей, содержащих атомы O, H, C, N, F, Na, S, Si и их соединения. Отчет Института механики МГУ, 1983, № 2857.
 22. Соколова И.А., Тирский Г.А. Свойства молекулярного переноса диссоциированных и ионизированных газов. *Журнал Прикладной Механики и Технической Физики*. 1988. №3. с.14-28.
 23. Соколова И.А. Процессы резонансного обмена в транспортных свойствах низкотемпературной плазмы. *Математическое моделирование*. 1989. том 1. № 3. с. 84-99.
 24. Devoto R.S. Transport coefficients of partially ionized argon. *Physics of Fluids*, 1967, v.10, N.2, pp.354-363.
 25. Термодинамические свойства индивидуальных веществ /ред. В.П.Глушко. - М.: Наука, 1978-1982.
 26. Андриатис А.В., Соколова И.А. Кислород. Транспортные и термодинамические свойства. *Журнал Математическое моделирование*. 1994. том 6. № 10. с. 88-128.
 27. Андриатис А.В., Соколова И.А. Двуокись углерода. Транспортные и термодинамические свойства. *Журнал Математическое моделирование*. 1995. том 7. № 2. с. 89-125.
 28. Васильевский С.А., Колесников А.Ф. Численное моделирование течений равновесной индукционной плазмы в цилиндрическом канале плазмотрона. *Изв. РАН. МЖГ*. 2000, № 5, с. 164-173.
 29. Васильевский С.А., Жлуктов С.В., Соколова И.А., Тирский Г.А. Приближенные формулы для коэффициентов переноса диссоциированного и ионизированного воздуха и их исследование в задачах гиперзвуковой аэродинамики и теплообмена. Отчет №3359 Института механики МГУ. М., 1986.

30. Асиновский Э.Н., Шабашов В.И. Экспериментальное исследование коэффициентов электропроводности и теплопроводности плазмы воздуха. Теплофизика высоких температур. 1969. т.7, №2. с.217-222.
31. Асиновский Э.Н., Пахомов Е.П. Анализ экспериментальных данных по вязкости газов в области высоких температур. Теплофизика высоких температур. 1970. т.8, №4. с.890-896.
32. Варгафтик Н.Б. Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей. - М.: Наука, 1972.
33. Варгафтик Н.Б., Филиппов Л.П., Тарзиманов А.Л., Тоцкий Е.Е. Теплопроводность жидкостей и газов. Справочные данные. - М.: Изд-во стандартов, 1978.
34. Uribe F.J. Mason E.A., Kestin J. A correlation scheme for the thermal conductivity of polyatomic gases at low density. Physica A, 1989, v.156, N 1, p 467-491.
35. Диоксид углерода. Коэффициенты вязкости, теплопроводности и число Прандтля разреженного газа в диапазоне температур 150...2000 К / Таблицы справочных стандартных данных. ГСССД 101-86. - М. : Изд-во стандартов, 1986.
36. Асиновский Э.Н., Низовский В.Л., Шабашов В.И. Измерение коэффициентов электропроводности и теплопроводности плазмы воздуха и углекислого газа при помощи стабилизированной электрической дуги. Теплофизика высоких температур. 1971. т.9, №1. с.37-41.

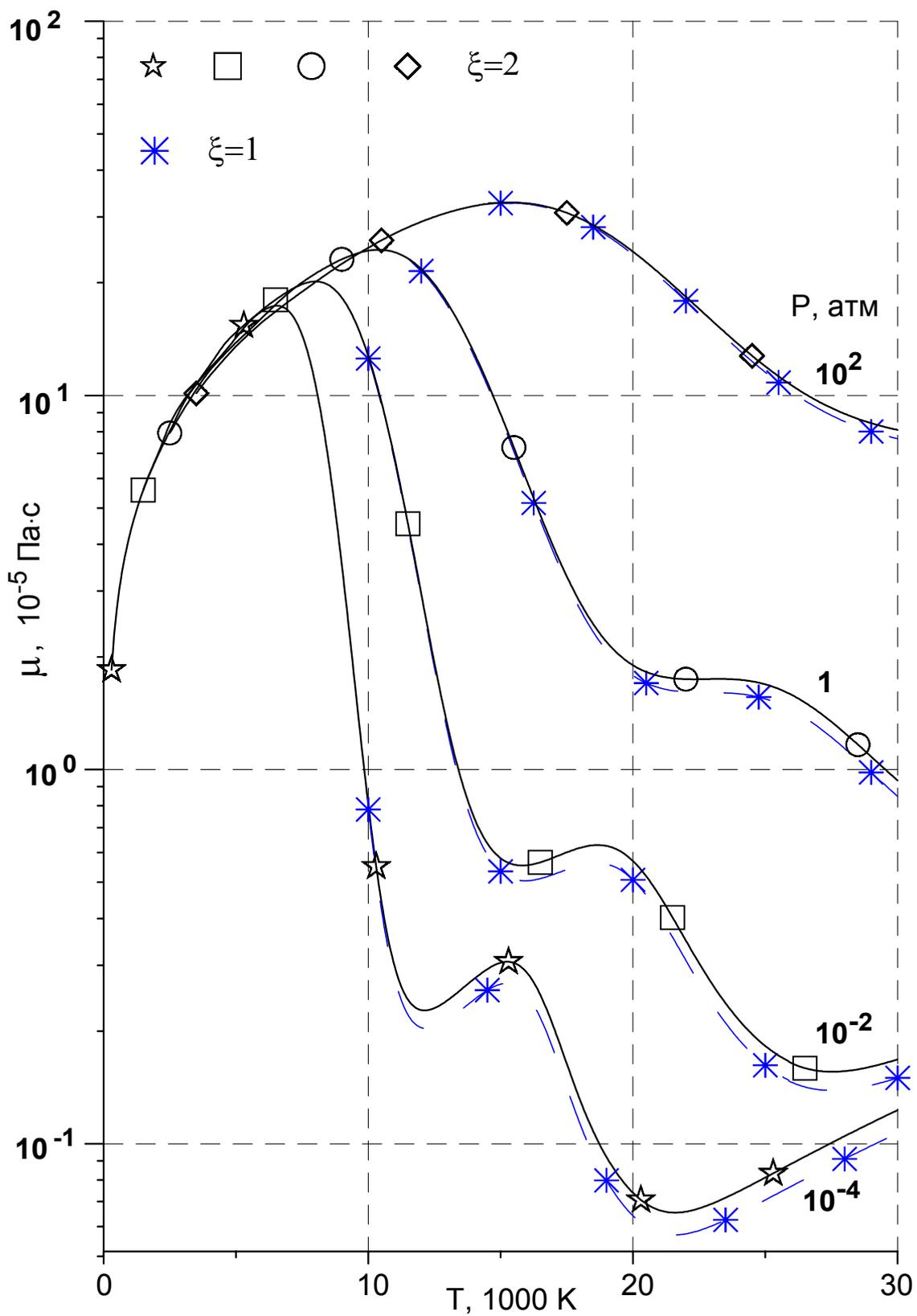


Рис. 1. Вязкость воздуха для давлений $P = 10^{-4}, 10^{-2}, 1, 100$ атм, рассчитанная во втором приближении (сплошные кривые) и в первом приближении (пунктир)

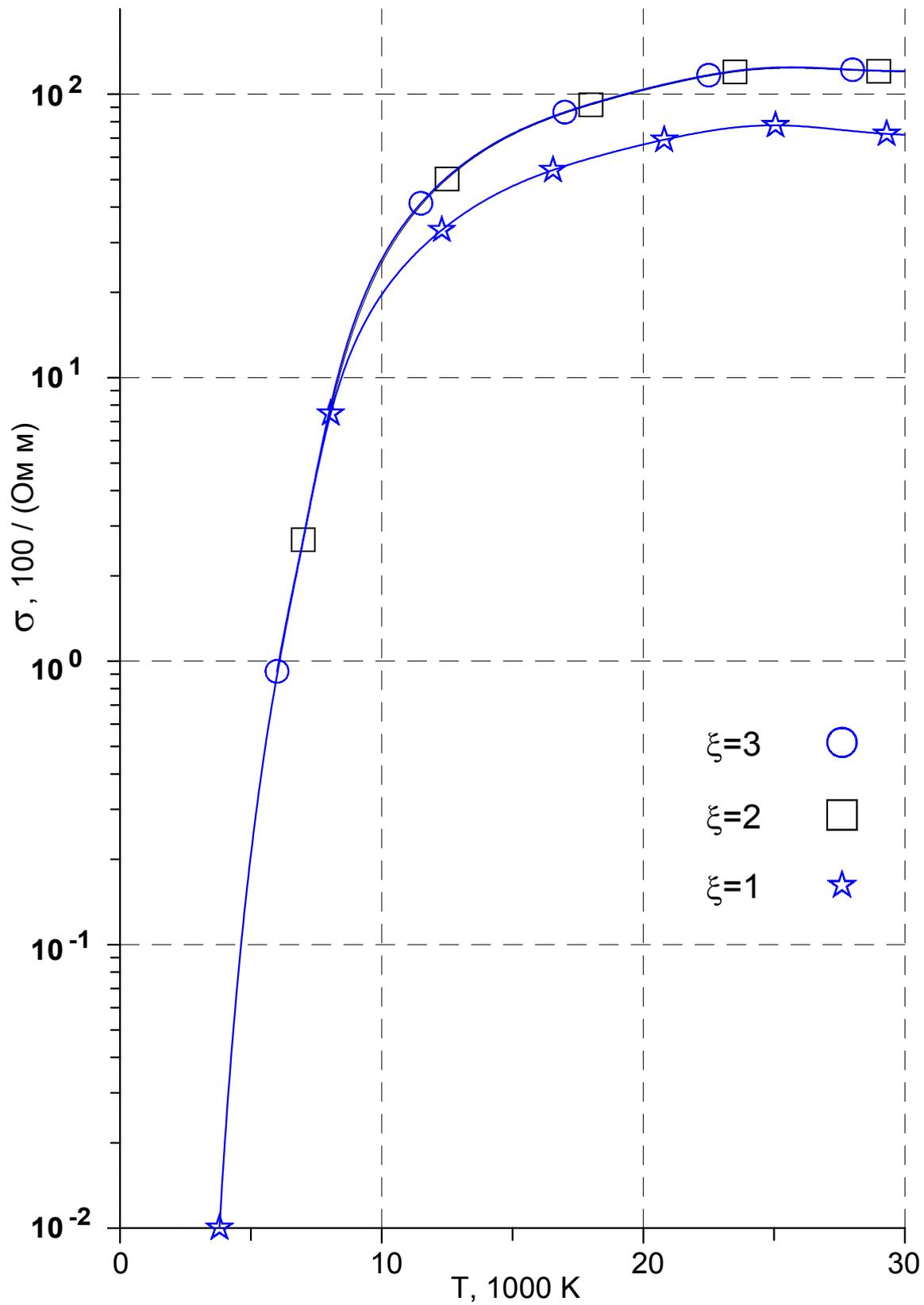


Рис. 2. Электропроводность плазмы воздуха $\sigma(\xi)$ при $P=1$ атм, рассчитанная в приближениях $1 \leq \xi \leq 3$

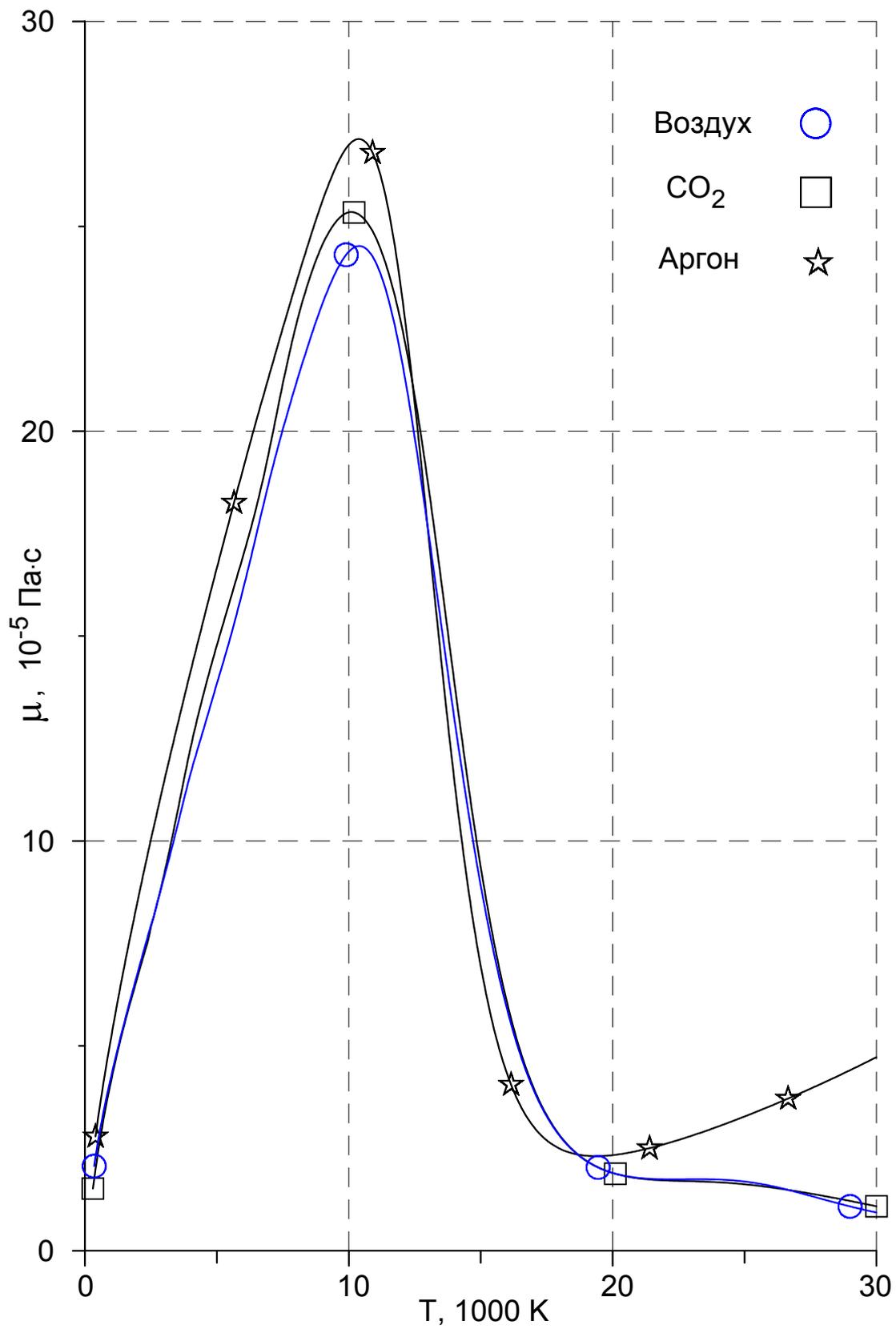


Рис. 3. Вязкость воздуха, углекислого газа и аргона при $P=1$ атм

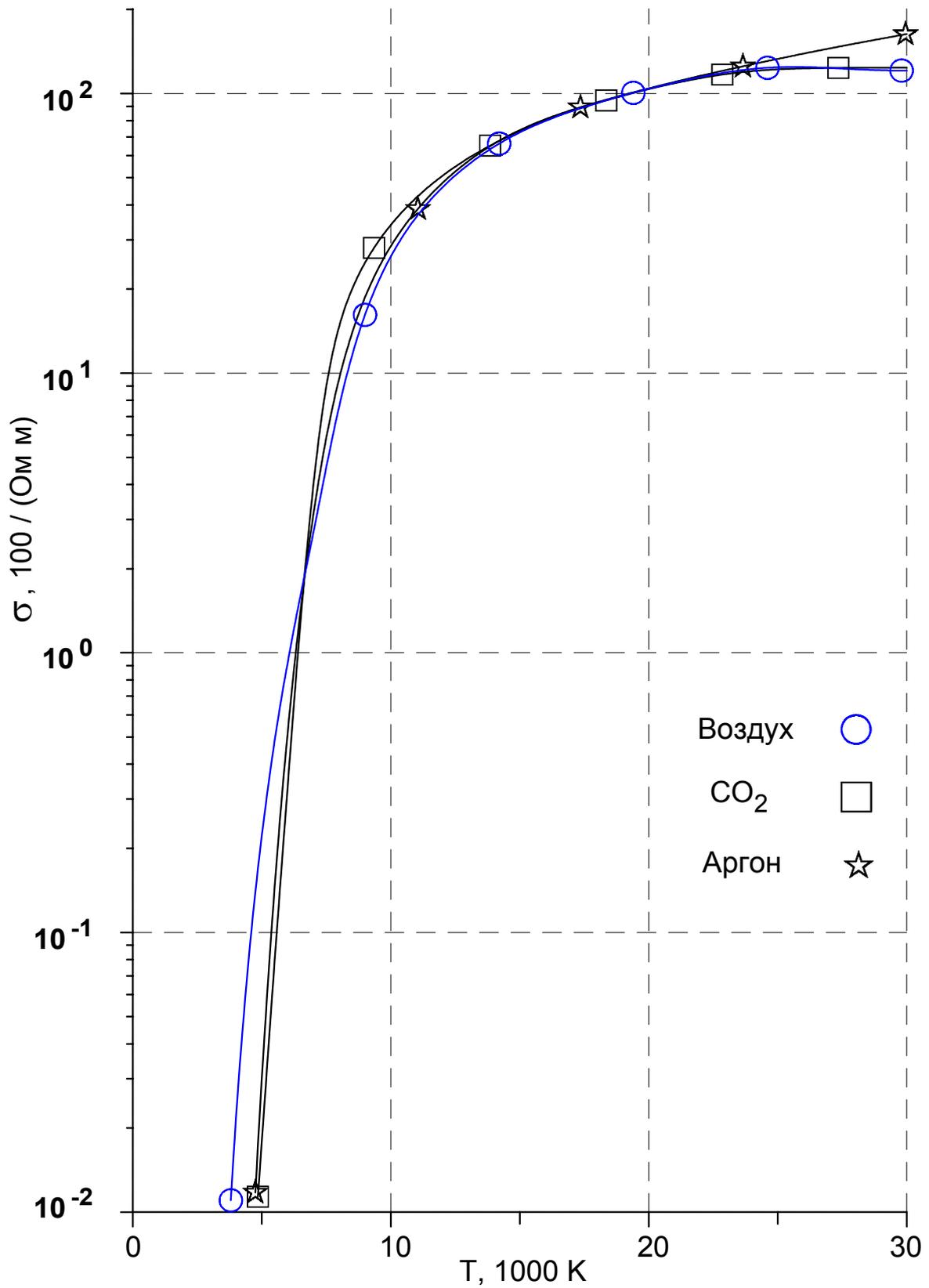


Рис. 4. Электропроводность воздуха, углекислого газа и аргона при $P=1 \text{ атм}$

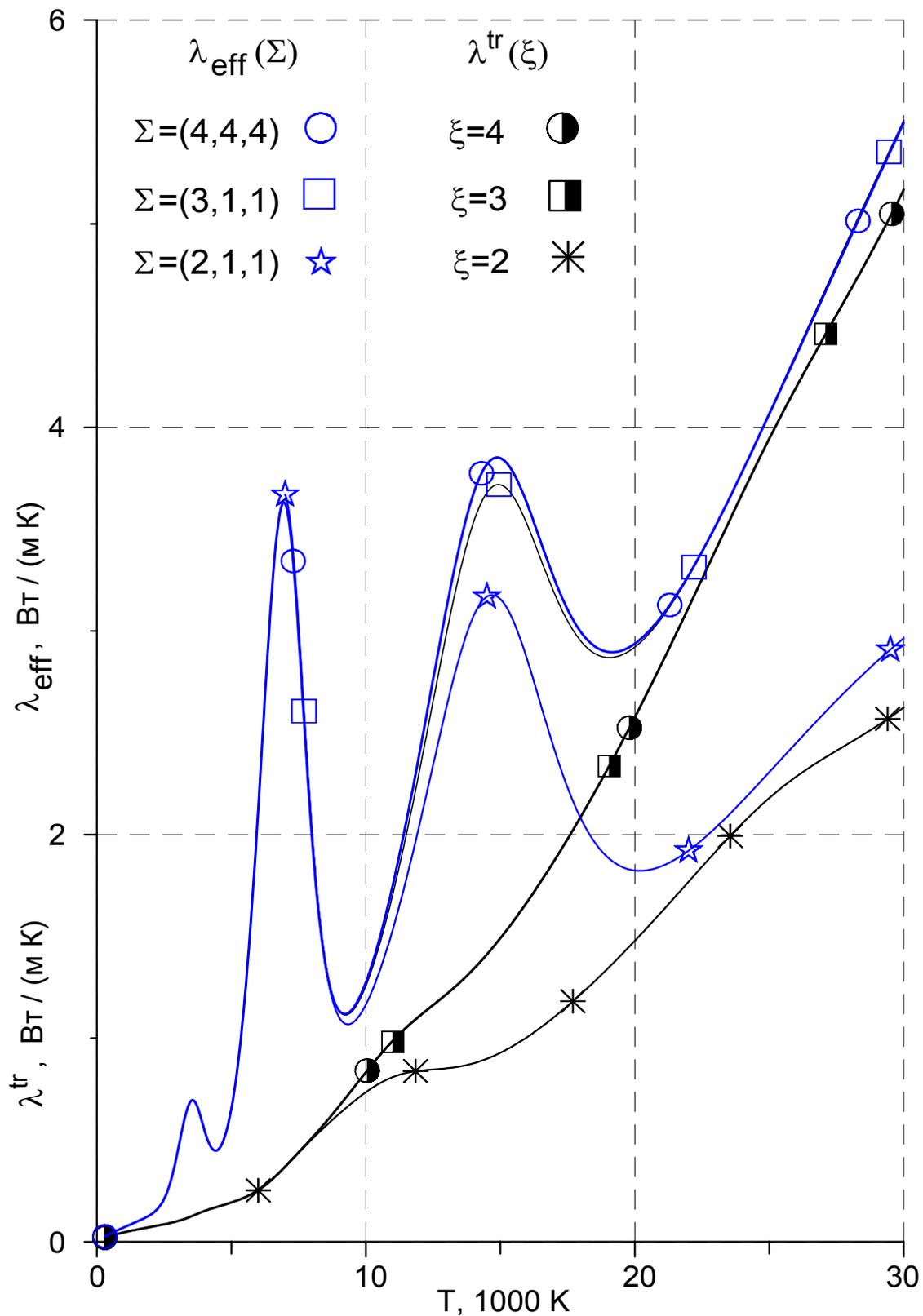


Рис. 5. Транспортная теплопроводность $\lambda^{\text{tr}}(\xi)$ и эффективная теплопроводность $\lambda_{\text{eff}}(\Sigma)$ для воздуха, $P=1$ атм, рассчитанные в приближениях:
 $2 \leq \xi_\lambda \leq 4$ и $\Sigma = (\xi_\lambda, \xi_{k_T}, \xi_\Delta) = (2,1,1); (3,1,1); (4,4,4)$

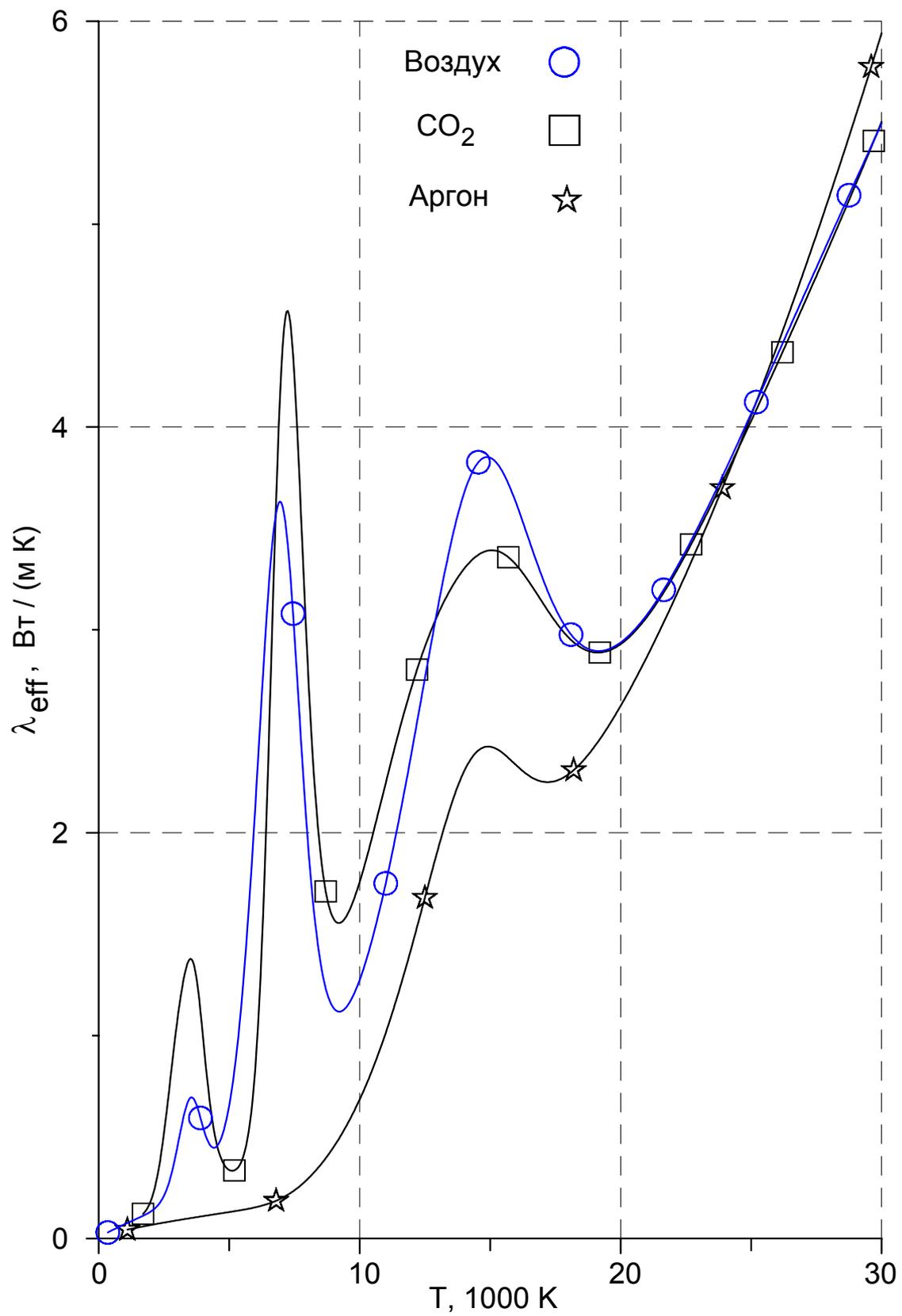


Рис. 6. Эффективная теплопроводность воздуха, углекислого газа и аргона при $P=1$ атм