УДК 533.27; 533.932

© 2003 г. **В. М. Жданов, Г. А. Тирский**

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА МОМЕНТОВ К ВЫВОДУ УРАВНЕНИЙ ПЕРЕНОСА ГАЗА И ПЛАЗМЫ С КОЭФФИЦИЕНТАМИ ПЕРЕНОСА В ВЫСШИХ ПРИБЛИЖЕНИЯХ

Метод моментов Грэда применяется для вывода линейных уравнений переноса массы, импульса и энергии компонентов и получения всех коэффициентов переноса (кинетических коэффициентов) для многокомпонентной смеси одноатомных газов. На основе линеаризованных уравнений Больцмана для компонентов смеси получена система уравнений для коэффициентов разложения неравновесной поправки к функции распределения по системе неприводимых тензорных полиномов Эрмита (уравнений моментов). Анализируются допущения, при которых эти уравнения переходят в систему алгебраических уравнений для определения массовых диффузионных потоков, потоков тепла компонентов и парциальных тензоров вязких напряжений. Показано преимущество формы записи уравнений переноса в представлении "силы через потоки" для решения конкретных задач течений многокомпонентных смесей по сравнению с классическим представлением "потоки через силы" в стандартном методе Чепмена–Энскога [1–3]. Рассматриваются различные формы представления уравнений переноса и выражений для коэффициентов переноса в произвольном порядке приближения по числу полиномов Сонина, удерживаемых в разложении функции распределения (метод Чепмена–Каулинга), что позволяет, в частности, установить непосредственную связь результатов, получаемых различными методами, и яснее проследить те ограничения, которые фактически используются при применении классического [1–3] и модифицированного [4, 5] способов вывода уравнений переноса и вычисления коэффициентов переноса в методе Чепмена–Энскога.

1. Введение. Формальная кинетическая теория одноатомных [1–3] и многоатомных [6–8] газовых смесей основывается на применении систем кинетических уравнений с интегралами столкновений в форме Больцмана или Ван Чанг–Уленбека. Эти системы при малых числах Кнудсена решаются с помощью традиционного метода Чепмена–Энскога (МЧЭ) [1–3] или метода моментов Грэда (ММГ) [9–11], которые позволяют получать как уравнения сохранения (баланса) массы, импульса и энергии для смесей газов (уравнения многокомпонентной гидродинамики), так и замыкающие их линейные уравнения переноса для диффузионных потоков компонентов смеси, потоков тепла и тензора напряжений.

В обычной схеме МЧЭ [1–3] линейные уравнения переноса записываются в виде, разрешенном относительно диффузионных потоков и потока тепла (для смеси) через градиенты молярных долей (концентраций) компонентов, градиенты давления, температуры и разности массовых внешних сил, действующих на различные компоненты смеси, тензор напряжений при этом линейно зависит от тензора скоростей деформаций и дивергенции среднемассовой скорости (сдвиговая и объемная вязкость). Эту форму записи уравнений переноса мы будет обозначать в дальнейшем термином "потоки через силы". Все коэффициенты, входящие в такую, можно сказать, "классическую" форму представления уравнений переноса, а именно: многокомпонентные коэффициенты диффузии, термодиффузии, "мгновенный" (не истинный) коэффициент теплопроводности λ', записываются в виде отношений определителей порядка $N\xi + 1$ к определителям порядка $N\xi$, которые получаются как результат решения усеченной бесконечной системы алгебраических уравнений по правилу Крамера. При этом N – число компонентов смеси, ξ – порядок приближений (число удерживаемых членов при отыскании коэффициентов переноса в виде рядов по ортогональным полиномам Сонина в методе Чепмена–Каулинга (МЧК) [1]. Элементы определителей в полученных решениях выражаются через так называемые скобочные интегралы (интегральные скобки) от полиномов Сонина разных порядков, которые, в свою очередь, представляются в виде линейных комбинаций набора (индексы l и s) $\Omega^{ls}_{\alpha\beta}(T)$ – интегралов, как функций температуры, зависящих также от параметров потенциалов взаимодействия частиц сортов α и β [1–3].

Для смесей одноатомных газов, образованных из электронейтральных частиц, наблюдается быстрая сходимость указанных рядов, поэтому для получения разумной точности при вычислении коэффициентов переноса достаточно учитывать лишь небольшое число членов разложения в этом методе. Учет только низших приближений при температурах от комнатных и примерно до температур ниже температуры диссоциации двухатомных молекул (2000–3000 K) дает ошибку, не превышающую, как правило, 0.3% для вязкости, 0.5% для теплопроводности и 10% для термодиффузии [2, 3]. Заметим, что так называемым низшим приближениям, по известной терминологии [3], соответствует удержание первых отличных от нуля коэффициентов в разложении коэффициентов переноса – это первое приближение ($\xi = 1$) для коэффициентов вязкости и диффузии и второе ($\xi = 2$) – для коэффициентов "мгновенной" теплопроводности λ' и термодиффузии, поэтому термодиффузию называют иногда эффектом второго порядка [2, 3].

Учет высших приближений при расчете коэффициентов переноса становится принципиально существенным в случае частично или полностью ионизованных газовых смесей [12–15]. Заметим, что методы решения кинетических уравнений, развитые для нейтральных газов, вполне успешно применяются и в случае плазмы, если рассматривать последнюю как многокомпонентную смесь нейтральных и заряженных частиц и устранять возникающую расходимость эффективных (проинтегрированных по углу рассеяния) сечений столкновений заряженных частиц с помощью экранированного кулоновского потенциала или с помощью операции формального обрезания параметра столкновений на длине порядка радиуса Дебая [10–12, 16]. Некоторые математические усложнения возникают при наличии магнитного поля, однако они вполне преодолеваются с помощью простого обобщения МЧЭ [1, 3] или ММГ [10, 11]. Численная сходимость коэффициентов переноса плазмы, получаемых с помощью известных методов решения кинетического уравнения, исследовалась во многих работах [12–15, 17, 18].

Следует отметить, что выражения для коэффициентов переноса, получаемые из решения линейных интегральных уравнений для возмущенных частей функции распределения с помощью МЧЭ как вариационным методом [3], так и непосредственным разложением в ряды по полиномам Сонина (МЧК [1]), оказываются полностью идентичными. Поскольку эти уравнения являются самосопряженными, вариационный метод дает монотонно убывающую или монотонно возрастающую последовательность значений коэффициентов переноса (за исключением, может быть, коэффициента термодиффузии). Из этого следует, что в каждом более высоком приближении получается более точное значение, чем в предыдущем, причем не происходит никаких осцилляций.

Как показывают проведенные к настоящему времени многочисленные расчеты коэффициентов переноса, скорость сходимости разложений для разных коэффициентов переноса различна и зависит от характера поведения потенциальной функции взаимодействующих частиц (например, "крутизна" потенциала) и от соотношения масс компонентов (в частности, от присутствия в смеси легкой компоненты). Для полностью ионизованной плазмы значения коэффициентов переноса, близкие к точным [19], дает третье приближение [13, 15, 20], для слабоионизованных газов порядок приближения для электронных коэффициентов переноса, обеспечивающий необходимую точность, существенно зависит от характера зависимости сечения электрон-атомных столкновений от энергии электрона.

Так, в случае частично ионизованного аргона резко выраженный рамзауэровский минимум в такой зависимости, наблюдаемый при низких энергиях электронов, приводит к заметному ухудшению сходимости приближений: при промежуточных степенях ионизации, например, для получения более или менее точного значения электропроводности аргоновой плазмы требуется по крайней мере шестое приближение, а в лорентцевском пределе – даже 12-е приближение не обеспечивает нужной точности [12, 14]. В связи с этим заметим, что формулы для расчета электронных коэффициентов переноса могут быть заметно упрощены, если воспользоваться малостью отношения массы электрона к массе тяжелых частиц [21, 22], однако и в этом случае расчет электронных коэффициентов в высших приближениях остается трудоемкой задачей. Разумеется, объем вычислений существенно возрастает, если рассматриваются высшие приближения для коэффициентов переноса тяжелых компонентов (атомов, молекул и ионов), поскольку при этом приходится рассчитывать определители высокого порядка со сложными по структуре элементами, зависящими от отношений масс компонентов, концентраций и температуры.

Проиллюстрируем сложность возникающих при таких расчетах проблем на примере задач гиперзвуковой аэродинамики и тепломассообмена. Частично ионизованная плазма воздуха, образующаяся за головной ударной волной при скорости входа космического аппарата в атмосферу со второй космической скоростью (11.2 км/с) и выше, содержит (без учета аргона) до одиннадцати компонентов (молекулы, атомы, ионы основных составляющих воздушной смеси и электроны) [23]. В задачах тепломассообмена при этих скоростях за счет вдува газообразных продуктов испарения и диссоциации теплозащитных покрытий, их химического взаимодействия с продуктами частично ионизованного воздуха в ударном слое образуется до нескольких десятков компонентов [24, 25]. Многократно ионизованная плазма с большим числом компонентов образуется в ударном слое около метеороидов, влетающих в атмосферы Земли и других планет. Поэтому расчеты течения в ударном слое многоэлементной частично ионизованной газовой смеси с учетом высших приближений (например, второго – для коэффициента вязкости, третьего – для теплопроводности и термодиффузии) с использованием классического представления "потоки через силы" [1–3] оказываются практически неосуществимыми и до сего времени не проводились. По такой классической схеме вычислялись коэффициенты переноса только для простой (одноэлементной) плазмы [13, 21, 26, 27] и для частично ионизованного восьмикомпонентного воздуха, находящегося в локальном термохимическом равновесии при статических условиях ($\mathbf{v} = 0$, $\nabla p = 0$) и фиксированном составе химических элементов [17, 18]. Между тем при реальной постановке задачи в потоке многокомпонентной смеси меняются не только температура и давление, но и элементный состав из-за разных диффузионных свойств компонентов, термо- и бародиффузии [28].

Наряду с отмеченными выше трудностями существует еще одно важное обстоятельство, затрудняющее использование выражений, записываемых в представлении "потоки через силы". Подстановка "классических" выражений для потоков диффузии и тепла в уравнения сохранения (баланса) массы компонентов и энергии смеси приводит к системе уравнений, не разрешенных относительно старших производных от искомых функций, поскольку в каждом из них будут присутствовать одновременно вторые производные от температуры и всех концентраций. В настоящее время нет общих методов эффективного численного решения таких систем уравнений даже в приближении различных асимптотически упрощенных по числу Рейнольдса вариантов уравнений Навье–Стокса [29, 30]. Для получения простой и удобной для численного решения системы уравнений многокомпонентной гидродинамики необходимо иметь уравнения переноса, разрешенные относительно "термодинамических сил" (которое будем называть представлением: "силы через потоки"). Тогда вместе с таким образом записанными уравнениями переноса, параболизованные уравнения Навье–Стокса (упрощенные с помощью отбрасывания в уравнениях неразрывности и энергии первых производных от потоков по маршевой (продольной) координате, которые имеют порядок обратного числа Рейнольдса) дадут систему уравнений, разрешенных относительно первых производных по нормали к обтекаемой поверхности от концентраций, температуры, а также от потоков диффузии и тепла, т.е. в нормальной форме Коши [31], для которой разработаны эффективные численные методы [23, 32, 33]. Преимущество уравнений переноса в форме "силы через потоки" состоит еще в том, что эта форма записи как бы специально приспособлена для вычисления всех эффективных коэффициентов переноса в конечном виде в случае локально – термохимически равновесных течений с меняющимися в потоке концентрациями химических элементов [34, 35]. Учет многокомпонентной диффузии в этом случае позволил обнаружить явление разделения химических элементов [28].

Представлению "силы через потоки" соответствует запись уравнений переноса массы компонентов в виде так называемых уравнений Стефана–Максвелла, в которых "термодинамическая сила диффузии", включающая градиенты концентраций, давления и разность массовых сил компонентов, выражается через линейную комбинацию диффузионных потоков и термодиффузионный член, пропорциональный градиенту температуры. В том же представлении записывается уравнение переноса тепла смеси, т.е. в виде, разрешенном относительно градиента температуры (с истинным коэффициентом теплопроводности λ) через массовые диффузионные потоки и поток тепла. Попытки получить эти выражения, используя уже известные "классические" результаты, были реализованы только в низших приближениях и требуют, в частности, применения операции двойного обращения матриц [36, 37].

Было показано [4, 5, 38], что уравнения переноса для многокомпонентной частично ионизованной смеси газов в представлении "силы через потоки" могут быть получены некоторым видоизменением метода решения бесконечной системы алгебраических уравнений для коэффициентов разложения в МЧК. При этом первые несколько коэффициентов выражаются через интересующие нас диффузионный и тепловой потоки, которые и могут быть найдены из решения общей системы уравнений в любом заданном приближении по числу полиномов Сонина в разложении. Соответствующие коэффициенты переноса записываются в виде отношения определителей порядка $N(\xi - 1) + 1$ к определителям $N(\xi - 1)$, элементами которых являются непосредственно интегральные скобки полиномов Сонина. В результате были получены существенно более простые (без необходимости двойного обращения матриц) выражения для истинного коэффициента теплопроводности смеси λ и термодиффузионных отношений и тем самым максимально простое выражение для потока тепла в произвольном приближении МЧК. В том же приближении были получены уравнения Стефана–Максвелла, т.е. уравнения переноса массы компонентов с учетом термодиффузии и поправок высших приближений к бинарным коэффициентам диффузии. Уравнения переноса, получаемые таким способом, были также обобщены на случай плазмы с учетом внешнего электромагнитного поля [39, 40].

Независимым способом вывода уравнений переноса и расчета коэффициентов переноса, альтернативным МЧЭ, является метод моментов Грэда (ММГ) [9–11]. Еще в 1962 г. [41] было показано, что применение этого метода в случае многокомпонентной газовой смеси дает возможность уже в известном приближении $13N$ моментов получить уравнения переноса массы компонентов в форме уравнений Стефана–Максвелла, т.е. в форме "силы через потоки", и выражение для потока тепла, записываемое сразу с "истинным" коэффициентом теплопроводности. При этом получаемые результаты соответствуют по точности расчета кинетических коэффициентов полному второму приближению в разложении по полиномам Сонина в МЧК [1–3]. Этот подход был затем обобщен на случай многотемпературной частично и полностью ионизованной многосортной плазмы в присутствии магнитного поля [42–45, 10, 11], а также на случай многоатомных газов и газовых смесей [7].

Вместе с тем возможно обобщение ММГ на случай учета большего числа полиномов и соответствующих им коэффициентов в разложении функции распределения [10, 11], что позволяет развить схему получения выражений для диффузионных и тепловых потоков в многокомпонентной газовой смеси в форме "силы через потоки" с коэффициентами переноса, вычисляемыми в любом приближении.

Ниже на основе линеаризованного кинетического уравнения Больцмана получена бесконечная система зацепляющихся квазилинейных дифференциальных уравнений для коэффициентов разложения функции распределения по системе неприводимых тензорных полиномов Эрмита (уравнений моментов). Рассматриваются допущения, при которых эти уравнения переходят в систему алгебраических уравнений для определения массовых диффузионных потоков, потоков тепла компонентов и парциальных тензоров вязких напряжений, эквивалентную системе уравнений, получаемой в модифицированном методе, развитом в работах [4, 5, 39, 40]. Обсуждаются различные формы представления уравнений переноса и выражений для коэффициентов переноса в произвольном порядке приближений, что позволяет, в частности, установить непосредственную связь результатов, получаемых различными независимыми подходами, и яснее проследить те ограничения, которые фактически используются при применении обычной и модифицированной процедуры решения системы кинетических уравнений Больцмана в МЧЭ.

2. Разложение функции распределения и уравнения моментов. Рассмотрим N-компонентную частично ионизованную газовую смесь, образованную из произвольного числа сортов нейтральных атомов, ионов и электронов. Неравновесное состояние такой смеси (плазмы) описывается функцией распределения частиц сорта α, которая ищется в виде

$$f_\alpha = f_\alpha^{(0)}(1+\phi_\alpha), \quad f_\alpha^{(0)} = n_\alpha\left(\frac{\gamma_\alpha}{2\pi}\right)^{3/2}\exp\left(-\frac{\gamma_\alpha c_\alpha^2}{2}\right) \tag{2.1}$$

где $f_\alpha^{(0)}$ – локальное максвелловское распределение, ϕ_α – малая добавка ($|\phi_\alpha| \ll 1$), $\gamma_\alpha = m_\alpha/kT$, m_α – масса частицы, T – температура, k – постоянная Больцмана, n_α – числовая плотность частиц сорта α, $\mathbf{c}_\alpha = \mathbf{v}_\alpha - \mathbf{u}$ – относительная скорость частицы, $\mathbf{u}$ – среднемассовая скорость смеси.

Поправка $\phi_\alpha(\mathbf{v}_\alpha, \mathbf{r}, t)$ удовлетворяет системе линеаризованных кинетических уравнений Больцмана [3, 8]

$$D_\alpha \ln f_\alpha^{(0)} + D_\alpha\phi_\alpha = \sum_\beta L_{\alpha\beta}\phi_\beta \tag{2.2}$$

где используется обозначение дифференциального оператора

$$D_\alpha = \frac{d}{dt} + (\mathbf{c}_\alpha\cdot\nabla) + \left(\frac{\mathbf{F}_\alpha}{m_\alpha}\cdot\nabla_v\right), \quad \frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + (\mathbf{u}\cdot\nabla) \tag{2.3}$$

При этом $\mathbf{F}_\alpha$ – внешняя сила, действующая на частицу, ∇_v оператор градиента в пространстве скоростей. В общем случае

$$\mathbf{F}_\alpha = e_\alpha \mathbf{E} + \mathbf{X}_\alpha$$

где $\mathbf{E}$ – напряженность электрического поля, $\mathbf{X}_\alpha$ – силы неэлектромагнитной природы, $e_\alpha = Z_\alpha e$ – заряд частицы (для электронов $Z_e = -1$). Будем предполагать для простоты, что магнитное поле отсутствует.

Линеаризованный оператор столкновений $L_{\alpha\beta}$ в правой части уравнения (2.2) определен таким образом, что [3]

$$L_{\alpha\beta}\phi_\beta = \int f_\beta^{(0)}(\phi'_\alpha + \phi'_{1\beta} - \phi_\alpha - \phi_{1\beta}) g \sigma_{\alpha\beta}(d\Omega) d\mathbf{v}_{1\beta} \tag{2.4}$$

Здесь g – относительная скорость сталкивающихся частиц, $\sigma_{\alpha\beta}(g, \Omega)$ – дифференциальное сечение рассеяния, Ω – телесный угол рассеяния, штрихи относятся к величинам, определяемым после столкновения частиц, нижний индекс единица вводится, чтобы отличать одинаковые сталкивающиеся частицы при $\alpha = \beta$.

Выражение для $D_\alpha \ln f_\alpha^{(0)}$ легко преобразуется с учетом того, что

$$\ln f_\alpha^{(0)} = \ln n_\alpha - \frac{3}{2}\ln T - \frac{1}{2}\gamma_\alpha(\mathbf{v}_\alpha - \mathbf{u})^2 + \text{const} \tag{2.5}$$

В результате

$$D_\alpha \ln f_\alpha^{(0)} = \left\{\left(\frac{1}{n_\alpha}\frac{dn_\alpha}{dt} + \nabla\cdot\mathbf{u}\right) + \frac{1}{2}(\gamma_\alpha c_\alpha^2 - 3)\left(\frac{1}{T}\frac{dT}{dt} + \frac{2}{3}\nabla\cdot\mathbf{u}\right) + \right.$$
$$\left. + \mathbf{c}_\alpha\left[\frac{1}{p_\alpha}\nabla p_\alpha + \gamma_\alpha\left(\frac{d\mathbf{u}}{dt} - \frac{\mathbf{F}_\alpha}{m_\alpha}\right)\right] + \frac{1}{2}\mathbf{c}_\alpha(\gamma_\alpha c_\alpha^2 - 5)\frac{1}{T}\nabla T + \gamma_\alpha\left(c_{\alpha i}c_{\alpha k} - \frac{1}{3}\delta_{ik}c_\alpha^2\right)\varepsilon_{ik}\right]\right\} \tag{2.6}$$

Здесь $p_\alpha = n_\alpha kT$ и вводится тензор скоростей сдвига (или тензор скоростей деформации со следом, равным нулю)

$$\varepsilon_{ik} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i}\right) - \frac{1}{3}\delta_{ik}\nabla\cdot\mathbf{u} \tag{2.7}$$

Разложим неравновесную поправку ϕ_α в ряд по ортогональной системе неприводимых[1] тензорных полиномов $H_\alpha^{mn}(\xi_\alpha)$ от безразмерной относительной скорости частиц $\xi_\alpha = \gamma_\alpha^{1/2}\mathbf{c}_\alpha$ [46, 10, 11]

$$\phi_\alpha = \sum_{m=0}^{\infty}\sum_{n=0}^{\infty}\sigma_{mn} a_{\alpha i_1\ldots i_m}^{mn}(\mathbf{r}, t) H_{\alpha i_1\ldots i_m}^{mn}(\xi_\alpha) \tag{2.8}$$

Здесь σ_{mn} – нормировочный множитель

$$\sigma_{mn} = \frac{(2m+1)!(m+n)!}{n!(m!)^2(2m+2n+1)!}$$

[1] Неприводимый тензор – тензор с нулевой сверткой по любой паре индексов; в частности, неприводимый тензор второго ранга в механике сплошной среды называется девиатором; тензор (2.7) – девиатор.

Нижние индексы $i_1, \ldots, i_m$ соответствуют декартовым компонентам тензора ранга m (в дальнейшем эти индексы опускаются).

Неприводимые тензорные полиномы Эрмита $H^{mn}(\boldsymbol{\xi})$ с точностью до нормировки представляют собой произведение полиномов Сонина $S^n_{m+1/2}(\xi^2/2)$ на тензорные сферические гармоники $P^{(m)}(\boldsymbol{\xi})$ [6, 46]

$$H^{mn}(\boldsymbol{\xi}) = (-2)^n n! S^n_{m+1/2}(\xi^2/2) P^{(m)}(\boldsymbol{\xi}) \tag{2.9}$$

Первые несколько полиномов $P^{(m)}(\boldsymbol{\xi})$ имеют вид

$$\begin{gathered} P^{(0)} = 1, \quad P_i^{(1)} = \xi_i, \quad P_{ik}^{(2)} = \xi_i \xi_k - \frac{1}{3}\delta_{ik}\xi^2 \\ P_{ikl}^{(3)} = \xi_i \xi_k \xi_l - \frac{1}{5}\xi^2(\xi_i \delta_{kl} + \xi_k \delta_{il} + \xi_l \delta_{ik}) \end{gathered} \tag{2.10}$$

Введем определение скалярного произведения функций в гильбертовом пространстве

$$\langle g_\alpha, h_\alpha \rangle = \frac{1}{n_\alpha} \int f_\alpha^{(0)} g_\alpha h_\alpha d\mathbf{c}_\alpha \tag{2.11}$$

Условие ортогональности для полиномов $H^{mn}(\boldsymbol{\xi})$ принимает тогда вид [8]

$$\langle H^{mn}, H^{m'n'} \rangle = (\alpha^{mn})^2 \delta_{mm'} \delta_{nn'} \Delta^{(m)} \tag{2.12}$$

где α^{mn} – нормировочный коэффициент:

$$\alpha^{mn} = \left[\frac{2^n m! (2m+2n+1)!!}{n!(2m+1)!!} \right]^{1/2}$$

$\delta_{ss'}$ – символ Кронекера, $\Delta^{(m)}$ – единичный проекционный тензор, в частности [8]

$$\Delta_{ik}^{(1)} = \delta_{ik}, \quad \Delta_{ikjl}^{(2)} = \frac{1}{2}(\delta_{ij}\delta_{kl} + \delta_{il}\delta_{kj}) - \frac{1}{3}\delta_{ik}\delta_{jl}$$

Коэффициенты a_α^{mn} в разложении (2.8) в соответствии с условиями ортогональности полиномов определяются соотношением

$$n_\alpha a_\alpha^{mn} = \int H_\alpha^{mn}(\xi_\alpha) f_\alpha^{(0)} \phi_\alpha d\mathbf{v} = n_\alpha \langle H_\alpha^{mn}, \phi_\alpha \rangle \tag{2.13}$$

что позволяет выразить эти коэффициенты через соответствующие моменты функции распределения. Первые несколько коэффициентов записываются как

$$\begin{gathered} a_\alpha^{00} = 0, \quad a_\alpha^{01} = 3(T_\alpha - T)/T, \quad a_{\alpha i}^{10} = \gamma_\alpha^{1/2} w_{\alpha i} \\ a_{\alpha i}^{11} = 2\gamma_\alpha^{1/2} h_{\alpha i}/p_\alpha, \quad a_{\alpha ik}^{20} = \pi_{\alpha ik}/p_\alpha \end{gathered} \tag{2.14}$$

где

$$\mathbf{h}_\alpha = \mathbf{q}_\alpha - 5/2 p_\alpha \mathbf{w}_\alpha \tag{2.15}$$

– приведенный парциальный поток тепла, а диффузионная скорость $\mathbf{w}_\alpha = \mathbf{u}_\alpha - \mathbf{u}$, парциальный тензор вязких напряжений $\hat{\boldsymbol{\pi}}_\alpha$ и парциальный поток тепла $\mathbf{q}_\alpha$ определены выражениями

$$\mathbf{w}_\alpha = \langle \mathbf{c}_\alpha, \phi_\alpha \rangle, \quad \hat{\boldsymbol{\pi}}_\alpha = \rho_\alpha \langle \overline{\mathbf{c}_\alpha \mathbf{c}_\alpha}, \phi_\alpha \rangle, \quad \mathbf{q}_\alpha = \frac{1}{2}\rho_\alpha \langle c_\alpha^2 \mathbf{c}_\alpha, \phi_\alpha \rangle \tag{2.16}$$

При этом $\rho_\alpha = m_\alpha n_\alpha$ – массовая плотность частиц сорта α, $\hat{\boldsymbol{\pi}}_\alpha = \hat{\mathbf{P}}_\alpha - p_\alpha \hat{\boldsymbol{\delta}}$, где $\hat{\mathbf{P}}_\alpha$ – парциальный тензор напряжений, $p_\alpha = n_\alpha kT$ – парциальное давление, $\hat{\boldsymbol{\delta}}$ – единичный тензор второго ранга. Температура частиц сорта α определена при этом как

$$kT_\alpha = kT + {}^1\!/_3\, m_\alpha \langle c_\alpha^2, \phi_\alpha \rangle \tag{2.17}$$

Обозначение типа $\overline{\text{aa}}\ldots$ здесь и в дальнейшем используется для неприводимых симметричных тензоров, так что, например, $(\overline{\mathbf{c}_\alpha \mathbf{c}_\alpha})_{ik} = c_{\alpha i} c_{\alpha k} - {}^1\!/_3 \delta_{ik} c_\alpha^2$.

Система линеаризованных уравнений моментов строится умножением кинетического уравнения (2.2) на $f_\alpha^{(0)} H_\alpha^{mn}$ с последующим интегрированием по скоростям. В общем виде она может быть представлена как

$$n_\alpha \langle H_\alpha^{mn}, D_\alpha \ln f_\alpha^{(0)} \rangle + n_\alpha \langle H_\alpha^{mn}, D_\alpha \phi_\alpha \rangle = R_\alpha^{mn} \tag{2.18}$$

где

$$R_\alpha^{mn} = \sum_\beta \int H_\alpha^{mn} f_\alpha^{(0)} L_{\alpha\beta} \phi_\beta d\mathbf{c}_\alpha = n_\alpha \langle H_\alpha^{mn}, L\phi_\alpha \rangle, \quad L\phi_\alpha = \sum_\beta L_{\alpha\beta}\phi_\beta \tag{2.19}$$

(R_α^{mn} – момент относительно интеграла столкновений).

Заметим, что каждое из слагаемых в выражении для $D_\alpha \ln f_\alpha^{(0)}$ содержит в качестве сомножителя какой-либо из неприводимых полиномов Эрмита, поскольку, по определению,

$$\begin{aligned} &H_\alpha^{00} = 1, \quad H_\alpha^{01} = \gamma_\alpha c_\alpha^2 - 3, \quad H_{\alpha i}^{10} = \gamma_\alpha^{1/2} c_{\alpha i} \\ &H_{\alpha i}^{11} = \gamma_\alpha^{1/2} c_{\alpha i} (\gamma_\alpha c_\alpha^2 - 5), \quad H_{\alpha ik}^{20} = \gamma_\alpha (c_{\alpha i} c_{\alpha k} - \delta_{ik} c_\alpha^2) \end{aligned} \tag{2.20}$$

Тогда вычисление первого члена в левой части уравнения (2.18) с учетом условия ортогональности для неприводимых полиномов Эрмита (2.12) дает

$$\begin{aligned} n_\alpha \langle H_\alpha^{mn}, D_\alpha \ln f_\alpha^{(0)} \rangle = n_\alpha \Bigg\{ &\left(\frac{1}{n_\alpha} \frac{dn_\alpha}{dt} + \nabla \cdot \mathbf{u} \right) \delta_{m0}\delta_{n0} + 3\left(\frac{1}{T}\frac{dT}{dt} + \frac{2}{3}\nabla \cdot \mathbf{u} \right)\delta_{m0}\delta_{n1} + \\ &+ \gamma_\alpha^{-1/2} \left[\frac{1}{p_\alpha}\nabla p_\alpha + \gamma_\alpha \left(\frac{d\mathbf{u}}{dt} - \frac{\mathbf{F}_\alpha}{m_\alpha} \right) \right] \delta_{m1}\delta_{n0} + 5\gamma_0^{-1/2} \nabla \ln T \delta_{m1}\delta_{n1} + 2\overline{\nabla \mathbf{u}}\,\delta_{m2}\delta_{n0} \Bigg\} \end{aligned} \tag{2.21}$$

Здесь введен неприводимый тензор второго ранга $\overline{\nabla \mathbf{u}}$, так что $(\overline{\nabla \mathbf{u}})_{ik} = \varepsilon_{ik}$.

В выражении, получаемом после соответствующего интегрирования во втором члене в левой части уравнения (2.18), опускаются все нелинейные члены, включающие произведения моментов (или коэффициентов $n_\alpha a_\alpha^{mn}$) на малые градиенты соответствующих термодинамических переменных, а также малые градиенты потенциала (слабые внешние поля). В результате получаем

$$n_\alpha \langle H_\alpha^{mn}, D_\alpha \phi_\alpha \rangle = \frac{dn_\alpha a_\alpha^{mn}}{dt} + \nabla n_\alpha \langle \mathbf{c}_\alpha H_\alpha^{mn}, \phi_\alpha \rangle + \text{нелинейные члены} \tag{2.22}$$

Второй (потоковый) член в правой части равенства (2.22) после подстановки в него разложения для ϕ_α (2.8) может быть представлен в виде линейной комбинации производных по координате от коэффициентов $(m + 1)$-й и $(m - 1)$-й тензорной размерности [8]

$$\begin{aligned} \nabla n_\alpha \langle \mathbf{c}_\alpha H_\alpha^{mn}, \phi_\alpha \rangle &= \sum_{kl} \sigma_{kl} \langle \mathbf{c}_\alpha H_\alpha^{mn}, H_\alpha^{kl} \rangle \nabla n_\alpha a_\alpha^{kl} = \\ &= \sum_l \sigma_{ml} (A_{\alpha mn}^{m+1,l} \nabla n_\alpha a_\alpha^{m+1,l} + B_{\alpha mn}^{m-1,l} \nabla n_\alpha a_\alpha^{m-1,l}) \end{aligned} \tag{2.23}$$

Коэффициенты A_α и B_α даются выражениями

$$A_{\alpha mn}^{m+1,l} = \frac{1}{2m+3} \langle \mathbf{c}_\alpha H_\alpha^{mn}, H_\alpha^{m+1,l} \rangle, \quad B_{\alpha mn}^{m-1,l} = \frac{1}{2m+3} \langle \mathbf{c}_\alpha H_\alpha^{mn}, H_\alpha^{m-1,l} \rangle \tag{2.24}$$

Обозначение $\nabla n_\alpha a_\alpha^{m-1,l}$ при $m \geq 2$ соответствует симметричному неприводимому тензору. Так, если $a_\alpha^{m-1,l}$ – вектор (для $m = 2$), то $\nabla n_\alpha a_\alpha^{1,l}$ – неприводимый тензор второго ранга с компонентами

$$\frac{1}{2} \left(\frac{\partial n_\alpha a_{\alpha i}^{1l}}{\partial x_j} + \frac{\partial n_\alpha a_{\alpha j}^{1l}}{\partial x_i} \right) - \frac{1}{3} \delta_{ij} \frac{\partial n_\alpha a_{\alpha l}^{1l}}{\partial x_l}$$

Обратимся к расчету правой части уравнений моментов (2.18) – величины R_α^{mn} (2.19). Для этого подставим в линеаризованный интеграл столкновений выражения для возмущений функции распределения ϕ_α и ϕ_β, используя разложение (2.8). В результате выражение (2.19) можно представить в виде

$$R_\alpha^{mn} = -\sum_\beta \sum_k \sum_l n_\alpha n_\beta \sigma_{kl} ([H^{kl}, H^{mn}]'_{\alpha\beta} a_\alpha^{kl} + [H^{kl}, H^{mn}]''_{\alpha\beta} a_\beta^{kl}) \tag{2.25}$$

где вводятся так называемые парциальные интегральные скобки от неприводимых полиномов Эрмита. Общее определение интегральных скобок имеет вид [1–3]

$$\begin{aligned} [F, G]'_{\alpha\beta} &= \frac{1}{n_\alpha n_\beta} \int f_\alpha^{(0)} f_\beta^{(0)} (F_\alpha - F'_\alpha) G_\alpha g \sigma_{\alpha\beta} d\Omega d\mathbf{c}_\alpha d\mathbf{c}_\beta \\ [F, G]''_{\alpha\beta} &= \frac{1}{n_\alpha n_\beta} \int f_\alpha^{(0)} f_\beta^{(0)} (F_\beta - F'_\beta) G_\alpha g \sigma_{\alpha\beta} d\Omega d\mathbf{c}_\alpha d\mathbf{c}_\beta \end{aligned} \tag{2.26}$$

Используем определение полиномов $H_\alpha^{mn}(\xi_\alpha)$ (2.9). Перейдем от переменной ξ_α к переменной $\mathbf{W}_\alpha$

$$\mathbf{W}_\alpha = \left(\frac{m_\alpha}{2kT} \right)^{1/2} \mathbf{c}_\alpha = 2^{-1/2} \xi_\alpha \tag{2.27}$$

Тогда

$$\begin{aligned} H_\alpha^{mn}(\mathbf{W}_\alpha) &= (-1)^n 2^{n+m/2} n! S_{m+1/2}^n (W_\alpha^2) R^{(m)}(\mathbf{W}_\alpha) \\ R^{(m)}(\mathbf{W}_\alpha) &= 2^{-m/2} P^{(m)}(\xi_\alpha) \end{aligned} \tag{2.28}$$

Для интегральных скобок от полиномов $R^{(m)}(\mathbf{W})$ имеет место соотношение [8]

$$[R^{(k)}, R^{(m)}] = \frac{1}{2m+1} [R^{(m)}, R^{(m)}] \delta_{km}$$

Окончательное выражение для R_α^{mn} принимает тогда вид

$$R_\alpha^{mn} = -\sum_\beta \sum_l C_{\alpha\beta}^{mnl} a_\beta^{ml} \tag{2.29}$$

где

$$C_{\alpha\beta}^{mnl} = \delta_{\alpha\beta} \sum_\gamma A_{\alpha\gamma}^{mnl} + B_{\alpha\beta}^{mnl} \tag{2.30}$$

а выражения для $A_{\alpha\beta}$ и $B_{\alpha\beta}$ записываются как

$$\begin{aligned} A_{\alpha\beta}^{mnl} &= n_\alpha n_\beta Q_{mnl}[S_{m+1/2}^l(W^2)R^m(\mathbf{W}), S_{m+1/2}^n(W^2)R^{(m)}(\mathbf{W})]'_{\alpha\beta} \\ B_{\alpha\beta}^{mnl} &= n_\alpha n_\beta Q_{mnl}[S_{m+1/2}^l(W^2)R^m(\mathbf{W}), S_{m+1/2}^n(W^2)R^{(m)}(\mathbf{W})]''_{\alpha\beta} \end{aligned} \tag{2.31}$$

Коэффициенты Q_{mnl} имеют вид

$$Q_{mnl} = (-2)^{n+l} 2^m \frac{n!l!}{2m+1} \sigma_{ml} = (-1)^{n+l} 2^{n+l+m} \frac{(2m)!(m+l)!n!}{(m!)^2(2m+2l+1)!} \tag{2.32}$$

Интегральные величины $[\ldots]'_{\alpha\beta}$ и $[\ldots]''_{\alpha\beta}$ соответствуют известным парциальным интегральным скобкам от полиномов Сонина, которые вводятся в МЧЭ [1–3].

Для первых двух тензорных полиномов $R^{(m)}(\mathbf{W})$, используемых при записи интегральных скобок в МЧЭ, имеем

$$R_i^{(1)}(\mathbf{W}) = W_i, \quad R_{ik}^{(2)}(\mathbf{W}) = W_i W_k - \delta_{ik} W^2$$

С учетом полученных выше выражений система линеаризованных уравнений для моментов (2.18) записывается в следующем окончательном виде:

$$\begin{aligned} &\frac{dn_\alpha a_\alpha^{mn}}{dt} + \sum_l \sigma_{ml}(A_{\alpha mn}^{m+1,l} \nabla n_\alpha a_\alpha^{m+1,l} + B_{\alpha mn}^{m-1,l} \nabla n_\alpha a_\alpha^{m-1,l}) + n_\alpha \Bigg\{ \left(\frac{1}{n_\alpha} \frac{dn_\alpha}{dt} + \nabla \cdot u \right) \delta_{m0} \delta_{n0} + \\ &+ 3\left(\frac{1}{T}\frac{dT}{dt} + \frac{2}{3} \nabla \cdot \mathbf{u} \right) \delta_{m0} \delta_{n1} + \gamma_\alpha^{-1/2} \left[\frac{1}{p_\alpha} \nabla p_\alpha + \gamma_\alpha \left(\frac{d\mathbf{u}}{dt} - \frac{\mathbf{F}_\alpha}{m_\alpha} \right) \right] \delta_{m1} \delta_{n0} + \\ &+ 5\gamma_\alpha^{-1/2} \nabla \ln T \delta_{m1} \delta_{n1} + 2\overline{\nabla \mathbf{u}} \delta_{m2} \delta_{n0} \Bigg\} = -\sum_\beta \sum_l C_{\alpha\beta}^{mnl} a_\beta^{ml} \end{aligned} \tag{2.33}$$

Уравнения (2.33) должны быть дополнены соотношениями

$$\sum_\alpha m_\alpha n_\alpha \gamma_\alpha^{-1/2} a_\alpha^{10} = 0, \quad \sum_\alpha n_\alpha a_\alpha^{01} = 0 \tag{2.34}$$

которые соответствуют условиям, вытекающим из определений диффузионных скоростей, среднемассовой скорости и температуры смеси,

$$\sum_\alpha m_\alpha n_\alpha \mathbf{w}_\alpha = 0, \quad \sum_\alpha n_\alpha T_\alpha = nT \tag{2.35}$$

Уравнения моментов (2.33) образуют бесконечную систему зацепляющихся уравнений для скалярных (m = 0), векторных (m = 1) и тензорных (m = 2, 3,...) величин.

Поиск конкретных решений возможен, если ограничиться конечным числом членов в разложении (2.8). Общая система уравнений моментов (2.33) в зависимости от принятых значений m и n распадается на независимые системы уравнений для определения скалярных, векторных и тензорных коэффициентов $n_\alpha a_\alpha^{mn}$. Так, при $m = 0$ и $n = 0$ эти уравнения соответствуют уравнению неразрывности, суммирование по α уравнений для $m = 1$ и $n = 0$, а также для $m = 0$ и $n = 1$ приводит к уравнению движения и линеаризованному уравнению энергии смеси. С учетом условий (2.35) соответствующие уравнения сохранения принимают вид

$$\frac{dn_\alpha}{dt} + n_\alpha \nabla \cdot \mathbf{u} + \nabla \cdot n_\alpha \mathbf{w}_\alpha = 0 \tag{2.36}$$

$$\rho \frac{d\mathbf{u}}{dt} + \nabla p + \nabla \hat{\boldsymbol{\pi}} + \sum_\alpha n_\alpha \mathbf{F}_\alpha = 0 \tag{2.37}$$

$$nk\frac{dT}{dt} + \frac{2}{3}p\nabla \cdot \mathbf{u} + \frac{2}{3}\nabla \cdot \mathbf{q} - kT\sum_\alpha \nabla \cdot n_\alpha \mathbf{w}_\alpha = 0 \tag{2.38}$$

Здесь $p = nkT$ – полное давление, $\hat{\boldsymbol{\pi}} = \sum_\alpha \hat{\boldsymbol{\pi}}_\alpha$ – тензор вязких напряжений, $\mathbf{q} = \sum_\alpha \mathbf{q}_\alpha$ – поток тепла смеси соответственно. Заметим, что с помощью уравнений (2.37) и (2.38) можно исключить из левой части уравнения (2.33) производные по времени $d\mathbf{u}/dt$ и dT/dT, в то время как уравнение неразрывности (2.36) в левой части (2.33) удовлетворяется тождественно.

3. Приближение 13N моментов. Наиболее часто используемым в методе моментов является известное приближение 13N моментов [9, 10]. В разложении функции распределения (2.8) сохраняются при этом члены, включающие тензорные полиномы не выше второго ранга ($m \le 2$) со значениями $n = 1$ для $m = 0$, $n = 0{,}1$ для $m = 1$ и $n = 0$ для $m = 2$. Уравнения моментов записываются для переменных n_α (или ρ_α), $\mathbf{u}$ и T, которые содержатся в весовой функции (локальном максвелловском распределении), а также для коэффициентов разложения a_α^{01}, a_α^{10}, a_α^{11} и a_α^{20}, которые выражаются через моменты функции распределения, имеющие явный физический смысл.

Несколько первых таких моментов – относительная разность температур $(T_\alpha - T)/T$, диффузионная скорость $\mathbf{w}_\alpha$, парциальный тензор вязких напряжений $\pi_{\alpha ik}$ и приведенный парциальный тепловой поток $\mathbf{h}_\alpha$ (2.15), которые связаны с соответствующими коэффициентами разложения соотношениями (2.14).

Разложение поправки к функции распределения в приближении 13N моментов принимает вид [10]

$$\phi_\alpha = a_{\alpha i}^{10}\xi_{\alpha i} + \frac{1}{6}a_\alpha^{01}(\xi_\alpha^2 - 3) + \frac{1}{2}a_{\alpha ik}^{20}\left(\xi_{\alpha i}\xi_{\alpha k} - \frac{1}{3}\delta_{ik}\xi_\alpha^2\right) + \frac{1}{10}a_{\alpha i}^{11}\xi_{\alpha i}(\xi_\alpha^2 - 5) \tag{3.1}$$

или в физических переменных (2.14)

$$\phi_\alpha = \gamma_\alpha \mathbf{w}_\alpha \cdot \mathbf{c}_\alpha + \frac{1}{2}\frac{T_\alpha - T}{T}(\gamma_\alpha c_\alpha^2 - 3) + \frac{1}{2}\gamma_\alpha \frac{\pi_{\alpha ik}}{p_\alpha}\left(c_{\alpha i}c_{\alpha k} - \frac{1}{3}\delta_{ik}c^2\right) + \frac{1}{5}\gamma_\alpha \frac{\mathbf{h}_\alpha \cdot \mathbf{c}_\alpha}{p_\alpha}(\gamma_\alpha c_\alpha^2 - 5) \tag{3.2}$$

Обратимся теперь к линеаризованным уравнениям моментов (2.33). В полную систему уравнений моментов входят, как уже отмечалось, известные уравнения сохранения числа частиц сорта α, импульса и энергии смеси (2.36)–(2.38). При $m = 0$ и $n = 1$

получаем систему уравнений для относительных разностей температур $(T_\alpha - T)/T$. Анализ показывает [10], что порядок этих величин (в отсутствие внешних сил) определяется пространственными производными от потоков тепла и диффузионного потока, а не градиентами исходных макроскопических параметров, как для остальных векторных и тензорных потоков, поэтому уравнения для разностей температур ниже не рассматриваются. При $m = 1$ и $n = 0{,}1$ из уравнений моментов (2.33) следует совместная система уравнений для коэффициентов a_α^{10} и a_α^{11} (или для диффузионных скоростей и приведенных потоков тепла частиц сорта α), а при $m = 2$ и $n = 0$ – уравнения для определения коэффициентов a_α^{20} (или парциальных тензоров вязких напряжений).

Вместо уравнений для коэффициентов $a_{\alpha i}^{10}$, $a_{\alpha ik}^{20}$ и $a_{\alpha i}^{11}$ удобно использовать уравнения непосредственно для физических величин $\mathbf{w}_\alpha$, $\pi_{\alpha ik}$ и $\mathbf{h}_\alpha$. Воспользовавшись соотношениями (2.14), можно представить эти уравнения в виде [10, 41]

$$\frac{d\rho_\alpha \mathbf{w}_\alpha}{dt} + \left(\nabla p_\alpha + \rho_\alpha \frac{d\mathbf{u}}{dt} - n_\alpha \mathbf{F}_\alpha\right) + \nabla \hat{\boldsymbol{\pi}}_\alpha = m_\alpha \gamma_\alpha^{-1/2} \mathbf{R}_\alpha^{10} \tag{3.3}$$

$$\frac{d\pi_{\alpha ik}}{dt} + 2p_\alpha \varepsilon_{ik} + \frac{4}{5}\left\{\frac{\partial q_{\alpha i}}{\partial x_k}\right\} = kTR_{\alpha ik}^{20} \tag{3.4}$$

$$\frac{d\mathbf{h}_\alpha}{dt} + \frac{5}{2}\frac{k}{m_\alpha} p_\alpha \nabla T + \frac{kT}{m_\alpha}\nabla \hat{\boldsymbol{\pi}}_\alpha = \frac{kT}{2}\gamma_\alpha^{-1/2}\mathbf{R}_\alpha^{11} \tag{3.5}$$

Здесь использованы сокращенные обозначения

$$\{A_i B_k\} = \frac{1}{2}(A_i B_k + B_i A_k) - \frac{1}{3}A_l B_l \delta_{ik}, \quad \varepsilon_{ik} = \left\{\frac{\partial u_i}{\partial x_k}\right\}$$

При этом $(\nabla \hat{\boldsymbol{\pi}}_\alpha)_i = \partial \pi_{\alpha ik}/\partial x_k$.

Конкретные выражения для правых частей уравнений (3.3)–(3.5) следуют из общего представления величин R_α^{mn} (2.29) и известных выражений для интегральных скобок от полиномов Сонина, связывающих их с так называемыми Ω-интегралами [1–3]. При этом общие выражения для правых частей в приближении 13N моментов имеют вид [10, 41–43]

$$m_\alpha \gamma_\alpha^{-1/2}\mathbf{R}_\alpha^{10} = \sum_\beta B_{\alpha\beta}^{(1)}(\mathbf{w}_\alpha - \mathbf{w}_\beta) + \sum \mu_{\alpha\beta} B_{\alpha\beta}^{(2)}\left(\frac{\mathbf{h}_\alpha}{m_\alpha p_\alpha} - \frac{\mathbf{h}_\beta}{m_\beta p_\beta}\right) \tag{3.6}$$

$$kTR_{\alpha ik}^{20} = \sum \frac{kT}{m_\alpha + m_\beta}\left(B_{\alpha\beta}^{(3)}\frac{\pi_{\alpha ik}}{p_\alpha} + B_{\alpha\beta}^{(4)}\frac{\pi_{\beta ik}}{p_\beta}\right) \tag{3.7}$$

$$\frac{kT}{2}\gamma_\alpha^{-1/2}\mathbf{R}_\alpha^{11} = \frac{kT}{m_\alpha}\sum\left[B_{\alpha\beta}^{(5)}\frac{\mathbf{h}_\alpha}{p_\alpha} + B_{\alpha\beta}^{(6)}\frac{\mathbf{h}_\beta}{p_\beta} + \frac{5}{2}\frac{\mu_{\alpha\beta}}{m_\alpha}B_{\alpha\beta}^{(2)}(\mathbf{w}_\alpha - \mathbf{w}_\beta)\right] \tag{3.8}$$

Здесь $\mu_{\alpha\beta} = m_\alpha m_\beta/(m_\alpha + m_\beta)$ – приведенная масса частиц сортов α и β, коэффициенты $B_{\alpha\beta}^{(n)}$ оказываются линейными функциями Ω-интегралов Чепмена-Каулинга [1]. В частности,

$$\begin{aligned} B_{\alpha\beta}^{(1)} &= -\frac{16}{3}n_\alpha n_\beta \mu_{\alpha\beta}\Omega_{\alpha\beta}^{11} \\ B_{\alpha\beta}^{(2)} &= -\frac{16}{3}n_\alpha n_\beta \mu_{\alpha\beta}\left(\frac{2}{5}\Omega_{\alpha\beta}^{12} - \Omega_{\alpha\beta}^{11}\right) \end{aligned} \tag{3.9}$$

При этом

$$\Omega_{\alpha\beta}^{lr} = \left(\frac{2\pi kT}{\mu_{\alpha\beta}}\right)^{1/2} \int_0^\infty \int_0^\pi \varsigma^{2r+3} e^{-\varsigma^2} (1 - \cos^l \chi) \sigma_{\alpha\beta}(\varsigma, \chi) \sin\chi d\chi d\varsigma \qquad (3.10)$$

Выражения для $B_{\alpha\beta}^{(n)}$ при $n = 3, 4, 5, 6$ приведены ранее в [10, 43].

Для дальнейшего упрощения уравнений моментов полезно провести некоторые оценки. Величина $B_{\alpha\beta}^{(1)}$ может быть представлена в виде $B_{\alpha\beta}^{(1)} = -n_\alpha \mu_{\alpha\beta} \tau_{\alpha\beta}^{-1}$, где $\tau_{\alpha\beta}^{-1} = (16/3) n_\beta \Omega_{\alpha\beta}^{11}$ некоторая эффективная частота столкновений частиц сортов α и β, поскольку $\Omega_{\alpha\beta}^{11} = \langle g_{\alpha\beta} \rangle Q_{\alpha\beta}$, где $\langle g_{\alpha\beta} \rangle = (8kT/\pi\mu_{\alpha\beta})^{1/2}$ – средняя относительная скорость частиц, $Q_{\alpha\beta}$ – эффективное диффузионное сечение рассеяния (для модели молекул – твердых упругих шариков совпадающее с геометрическим сечением столкновений). Конкретные расчеты показывают, что все остальные коэффициенты $B_{\alpha\beta}^{(n)}$ имеют порядок величины коэффициента $B_{\alpha\beta}^{(1)}$.

Примем теперь определенные условия макроскопичного (гидродинамического) описания газовой смеси, а именно: будем считать, что макроскопические параметры компонентов и смеси в целом мало меняются на расстояниях и за времена порядка средних характерных длины λ и времени свободного пробега τ, т.е.

$$\lambda / L_0 \ll 1, \quad \tau / \tau_0 \ll 1 \qquad (3.11)$$

где L_0 и τ_0 – характерные линейный и временной масштабы изменения макроскопических величин. Заметим, что условия (3.11) соответствуют малости числа Кнудсена, что обычно принимается в МЧЭ [1–3].

Учитывая порядок величины коэффициентов $B_{\alpha\beta}^{(n)}$, легко обнаружить, что в силу второго условия (3.11) можно пренебречь производными от соответствующих моментов по времени в левых частях уравнений (3.3)–(3.5) по сравнению с правыми. Фактически это означает, что в рассматриваемом случае медленного изменения параметров смеси во времени по истечении промежутка времени, равного нескольким временам столкновений частиц, наступает квазиравновесие, к которому вместо уравнений (3.3)–(3.5) приближенно применима система уравнений, не содержащих производных по времени от моментов функции распределения.

Члены вида $\nabla \hat{\pi}_\alpha$ и $\partial q_{\alpha i} / \partial x_k$ в уравнениях (3.3)–(3.5), как правило, также имеют порядок $(\lambda / L_0)^2$; в МЧЭ их учет соответствует барнеттовскому приближению [1, 3]. Было показано [41], что необходимость в учете первого из них может возникнуть при рассмотрении диффузии компонентов смеси в случае медленных течений (например, для установившегося вязкого потока смеси), когда существенно различными оказываются продольный и поперечный масштабы изменения параметров газа в потоке и производная от тензора вязких напряжений смеси по поперечной координате имеет порядок величины продольного градиента давления. К этому вопросу обратимся в следующем разделе.

4. Уравнения переноса массы компонентов в форме Стефана–Максвелла. Покажем теперь, что из уравнений (3.3) можно получить важные соотношения для определения диффузионных скоростей компонентов смеси в форме, соответствующей обсуждавшемуся в разд. 1 представлению "силы через потоки". Опуская, в соответствии с условиями (3.11), член $d\rho_\alpha \mathbf{w}_\alpha / dt$ в левой части уравнения (3.3), подставим вместо $d\mathbf{u}/dt$ выражение, следующее из общего уравнения движения смеси (2.37). В результате вместо левой части получаем

$$(\nabla p_\alpha - c_\alpha \nabla p) + \left(n_\alpha \mathbf{F}_\alpha - c_\alpha \sum_\alpha n_\alpha \mathbf{F}_\alpha\right) + (\nabla \hat{\boldsymbol{\pi}}_\alpha - c_\alpha \nabla \hat{\boldsymbol{\pi}})$$

где $c_\alpha = \rho_\alpha/\rho$ – относительная массовая концентрация частиц сорта α.

Рассмотрим сначала случай, когда членами с производными от тензоров вязких напряжений можно пренебречь, считая их малыми. Система уравнений (3.3) принимает тогда вид [10, 41]

$$p\mathbf{d}_\alpha = \sum_\beta B^{(1)}_{\alpha\beta}(\mathbf{w}_\alpha - \mathbf{w}_\beta) + \sum \mu_{\alpha\beta} B^{(2)}_{\alpha\beta}\left(\frac{\mathbf{h}_\alpha}{m_\alpha p_\alpha} - \frac{\mathbf{h}_\beta}{m_\beta p_\beta}\right) \qquad (4.1)$$

где вводится вектор $\mathbf{d}_\alpha$, который называется вектором диффузионной силы (или, по терминологии неравновесной термодинамики, "термодинамической силой диффузии" [47]) и определяется как [2, 3]

$$\mathbf{d}_\alpha = \nabla x_\alpha + (x_\alpha - c_\alpha)\nabla \ln p - p^{-1}\left(n_\alpha \mathbf{F}_\alpha - c_\alpha \sum_{\beta=1}^{N} n_\beta \mathbf{F}_\beta\right) \qquad (4.2)$$

Здесь $x_\alpha = n_\alpha/n$ – относительная молярная концентрация частиц сорта α.

Другой важный случай соответствует диффузии при установившемся вязком течении газовой смеси в канале [41], когда в уравнении движения (2.37) можно положить $d\mathbf{u}/dt = 0$. В результате это уравнение принимает вид

$$\nabla p + \nabla \hat{\boldsymbol{\pi}} - \sum_\alpha n_\alpha \mathbf{F}_\alpha = 0$$

а левая часть уравнения (3.3) записывается как

$$\nabla p_\alpha + \nabla \hat{\boldsymbol{\pi}}_\alpha - n_\alpha \mathbf{F}_\alpha$$

Ниже будет показано, что решение уравнений моментов для тензорных коэффициентов разложения дает

$$\pi_{\alpha ik} = -2\eta_\alpha \varepsilon_{ik}, \quad \pi_{ik} = \sum_\alpha \pi_{\alpha ik} = -2\eta \varepsilon_{ik} \qquad (4.3)$$

где η_α и η – парциальный и полный коэффициенты вязкости. В этом случае, считая η_α и η постоянными (или слабо зависящими от координат), получаем

$$\nabla \hat{\boldsymbol{\pi}}_\alpha = (\eta_\alpha/\eta)\nabla \hat{\boldsymbol{\pi}} = -(\eta_\alpha/\eta)\left(\nabla p - \sum_\alpha n_\alpha \mathbf{F}_\alpha\right)$$

В результате система уравнений переноса компонентов в установившемся вязком потоке газа принимает вид

$$p\mathbf{d}^v_\alpha = \sum_\beta B^{(1)}_{\alpha\beta}(\mathbf{w}_\alpha - \mathbf{w}_\beta) + \sum \mu_{\alpha\beta} B^{(2)}_{\alpha\beta}\left(\frac{\mathbf{h}_\alpha}{m_\alpha p_\alpha} - \frac{\mathbf{h}_\beta}{m_\beta p_\beta}\right) \qquad (4.4)$$

где

$$\mathbf{d}^v_\alpha = \nabla x_\alpha + \left(x_\alpha - \frac{\eta_\alpha}{\eta}\right)\nabla \ln p - p^{-1}\left(n_\alpha \mathbf{F}_\alpha - \frac{\eta_\alpha}{\eta}\sum_{\beta=1}^{N} n_\beta \mathbf{F}_\beta\right) \qquad (4.5)$$

Основной эффект, проявляющийся в этом случае, заключается в переопределении коэффициента бародиффузии и силового члена в уравнениях для диффузионных скоростей компонентов [41], поскольку величина c_α в определении (4.2) заменяется отношением η_α/η. В результате бародиффузионное отношение в отличие от обычного случая становится существенно кинетической величиной и зависит не только от различий масс частиц компонентов, но и от разницы эффективных сечений столкновений частиц различного сорта [41].

Физический смысл уравнений для диффузионных скоростей компонентов становится более очевидным, если заметить, что уравнения (4.1) или (4.4) могут быть получены непосредственно из уравнения движения отдельного компонента смеси, получаемого в результате умножения полного (нелинеаризованного) кинетического уравнения на $\psi_{\alpha i} = m_\alpha v_{\alpha i}$ и интегрирования по скоростям. Это уравнение может быть представлено в виде [10]

$$\rho_\alpha \frac{d_\alpha \mathbf{u}_\alpha}{dt} + \nabla \hat{\mathbf{P}}^*_\alpha - n_\alpha \mathbf{F}_\alpha = \mathbf{R}_\alpha$$

$$d_\alpha/dt = \partial/\partial t + \mathbf{u}_{\alpha l}\partial/\partial x_l \quad (\nabla \mathbf{P}^*_\alpha)_i = \partial p^*_{\alpha ik}/\partial x_k \tag{4.6}$$

Величина $\mathbf{P}^*_{\alpha ik}$ связана с $\mathbf{P}_{\alpha ik}$ соотношением

$$\mathbf{P}^*_{\alpha ik} = \mathbf{P}_{\alpha ik} - \rho_\alpha w_{\alpha i} w_{\alpha k}, \quad \mathbf{P}_{\alpha ik} = p_\alpha \delta_{ik} + \pi_{\alpha ik}$$

На практике различие между $\mathbf{P}^*_{\alpha ik}$ и $\mathbf{P}_{\alpha ik}$ оказывается малосущественным, поскольку пренебрежение квадратичными относительно диффузионных скоростей членами соответствует пренебрежению членами порядка $(\lambda/L_0)^2$. Величина $\mathbf{R}_\alpha = m_\alpha \gamma_\alpha^{-1/2} \mathbf{R}_\alpha^{10}$ представляет собой величину среднего импульса, передаваемого при столкновениях частиц сорта α со всеми частицами остальных сортов смеси. Ее называют также "диффузионной силой трения" [10]. В первом члене слева в уравнении (4.6) можно заменить член $d_\alpha \mathbf{u}_\alpha/dt$ на $d\mathbf{u}/dt$, что соответствует пренебрежению членами порядка $d\mathbf{w}_\alpha/dt$ по сравнению с членами в правой части, имеющими порядок $\tau_{\alpha\beta}^{-1}\mathbf{w}_\alpha$, и согласуется с условиями (3.11). В результате приходим к исходным уравнениям для диффузионных скоростей (3.3), в которых надо опустить член с производной по времени от $\rho_\alpha \mathbf{w}_\alpha$, а следовательно, и к уравнениям (4.1) или (4.5).

Коэффициенты $B^{(1)}_{\alpha\beta}$ и $B^{(2)}_{\alpha\beta}$ в правой части уравнения (4.1) можно выразить с помощью коэффициента бинарной диффузии $[D_{\alpha\beta}]_1$, соответствующего первому приближению в разложении по полиномам Сонина в МЧК [1–3], и коэффициента $C^*_{\alpha\beta}$

$$[D_{\alpha\beta}]_1 = \frac{3kT}{16 n \mu_{\alpha\beta} \Omega^{11}_{\alpha\beta}}, \quad C^*_{\alpha\beta} = \frac{\Omega^{12}_{\alpha\beta}}{3\Omega^{11}_{\alpha\beta}} \tag{4.7}$$

В результате уравнения (4.1) переписываются в виде

$$\sum_\beta \frac{n_\alpha n_\beta kT}{n[D_{\alpha\beta}]_1}(\mathbf{w}_\alpha - \mathbf{w}_\beta) = -p\mathbf{d}_\alpha + \sum_\beta \xi_{\alpha\beta}\left(\frac{\mathbf{h}_\beta}{m_\beta n_\beta} - \frac{\mathbf{h}_\alpha}{m_\alpha n_\alpha}\right) \tag{4.8}$$

Здесь

$$\xi_{\alpha\beta} = \frac{n_\alpha n_\beta}{n[D_{\alpha\beta}]_1}\mu_{\alpha\beta}\left(\frac{6}{5}C^*_{\alpha\beta} - 1\right), \quad \beta \neq \alpha \tag{4.9}$$

Учет второго члена в правой части уравнения (4.8) (после подстановки в него выражений для парциальных приведенных потоков тепла) дает вклад, соответствующий термодиффузии и поправкам второго приближения (по числу полиномов Сонина, учитываемых в разложении в МЧК) к коэффициентам бинарной диффузии. Если $\xi_{\alpha\beta} = 0$ (что имеет место, в частности, для модели максвелловских молекул, участвующих в столкновениях), уравнения для определения диффузионных скоростей компонентов принимают вид

$$\sum_{\beta} \frac{n_\alpha n_\beta kT}{n[D_{\alpha\beta}]_1}(\mathbf{w}_\alpha - \mathbf{w}_\beta) = -p\mathbf{d}_\alpha \tag{4.10}$$

что соответствует обычному представлению уравнений переноса компонентов в многокомпонентной смеси в форме Стефана–Максвелла. Уравнения (4.10) по точности расчета коэффициентов переноса соответствуют первому приближению МЧК. Уравнения, получаемые в результате подстановки в правую часть уравнения (4.8) выражений для парциальных приведенных потоков тепла $\mathbf{h}_\alpha$ и $\mathbf{h}_\beta$, соответствуют следующему (второму) приближению МЧК.

5. Поток тепла и тензор вязких напряжений. Парциальные приведенные потоки тепла находятся из решения уравнений (3.5), в которых опускаем производную по времени $d\mathbf{h}_\alpha/dt$ и производную по координате $\partial\pi_{\alpha ik}/\partial x_k$. В вязком потоке смеси учет последнего члена приводит к дополнительному вкладу в полный поток тепла, пропорциональный градиенту давления, а также к поправкам второго приближения к постоянной бародиффузии в уравнениях для диффузионных скоростей компонентов [41, 10].

Получаемую при этом систему уравнений с учетом выражения (3.8) и вида коэффициентов $B^{(n)}_{\alpha\beta}$ при $n = 5, 6, 7$ [10, 41, 43] можно записать в виде

$$\frac{p^2}{T}\sum_{\beta=1}^{N} \Lambda^{11}_{\alpha\beta}\frac{\mathbf{h}_\beta}{p_\beta} = -\frac{p_\alpha}{T}\nabla T - \sum_{\beta\neq\alpha}\frac{kT}{m_\alpha}\xi_{\alpha\beta}(\mathbf{w}_\alpha - \mathbf{w}_\beta) \tag{5.1}$$

Коэффициенты $\Lambda^{11}_{\alpha\beta}$ определены как [3,10]

$$\Lambda^{11}_{\alpha\alpha} = \frac{x_\alpha^2}{[\lambda_{\alpha\alpha}]_1} + \frac{4}{25}\frac{T}{p}\sum_{\beta\neq\alpha}\frac{x_\alpha x_\beta}{(m_\alpha + m_\beta)^2 n[D_{\alpha\beta}]_1}\times$$

$$\times\left(\frac{15}{2}m_\alpha^2 + \frac{25}{4}m_\beta^2 + 3m_\beta^2 B^*_{\alpha\beta} + 4m_\alpha m_\beta A^*_{\alpha\beta}\right) \tag{5.2}$$

$$\Lambda^{11}_{\alpha\beta} = -\frac{4}{25}\frac{T}{p}\frac{m_\alpha m_\beta}{(m_\alpha + m_\beta)^2}\frac{x_\alpha x_\beta}{n[D_{\alpha\beta}]_1}\left(\frac{55}{4} - 3B^*_{\alpha\beta} - 4A^*_{\alpha\beta}\right), \quad \beta\neq\alpha$$

Здесь

$$[\lambda_{\alpha\alpha}]_1 = \frac{75}{32}\frac{k^2T}{m_\alpha\Omega^{22}_{\alpha\alpha}}, \quad A^*_{\alpha\beta} = \frac{\Omega^{22}_{\alpha\beta}}{2\Omega^{11}_{\alpha\beta}}, \quad B^*_{\alpha\beta} = \frac{5\Omega^{12}_{\alpha\beta} - \Omega^{13}_{\alpha\beta}}{3\Omega^{11}_{\alpha\beta}} \tag{5.3}$$

$[\lambda_{\alpha\alpha}]_1$ – теплопроводность чистого газа, образованного из частиц сорта α, рассчитанная в первом приближении МЧК [1–3], $[D_{\alpha\beta}]_1$ – бинарный коэффициент диффузии частиц сортов α и β, определяемый выражением (4.7).

Решение уравнений (5.1) может быть представлено в виде

$$\mathbf{h}_\alpha = -\lambda_\alpha \nabla T - \frac{kT^2}{p} \sum_{\beta=1}^{N} \sum_{\gamma=1}^{N} \frac{x_\alpha}{m_\beta} \xi_{\beta\gamma} \frac{|\Lambda^{11}|_{\beta\alpha}}{|\Lambda^{11}|} (\mathbf{w}_\beta - \mathbf{w}_\gamma) \tag{5.4}$$

Здесь

$$\lambda_\alpha = x_\alpha \sum_{\beta=1}^{N} x_\beta \frac{|\Lambda^{11}|_{\beta\alpha}}{|\Lambda^{11}|} \tag{5.5}$$

– парциальный коэффициент теплопроводности. Обозначения $|A|$ и $|A|_{\alpha\beta}$ соответствуют определителю порядка N, составленному из коэффициентов $A_{\alpha\beta}$, и алгебраическому дополнению элемента $\beta\alpha$ определителя.

Полный поток тепла в смеси в соответствии с соотношением (2.15) для $\mathbf{h}_\alpha$ и в результате суммирования по α определяется выражением

$$\mathbf{q} = \frac{5}{2} \sum_{\alpha=1}^{N} p_\alpha \mathbf{w}_\alpha + \sum_{\alpha=1}^{N} \mathbf{h}_\alpha \tag{5.6}$$

или с учетом определения (5.4) выражением

$$\mathbf{q} = \frac{5}{2} \sum_{\alpha=1}^{N} p_\alpha \mathbf{w}_\alpha - \lambda \nabla T - \frac{kT^2}{p} \sum_{\alpha=1}^{N} \sum_{\beta=1}^{N} \sum_{\gamma=1}^{N} \frac{x_\alpha}{m_\beta} \xi_{\beta\gamma} \frac{|\Lambda^{11}|_{\beta\alpha}}{|\Lambda^{11}|} (\mathbf{w}_\beta - \mathbf{w}_\gamma) \tag{5.7}$$

Последний член справа можно преобразовать, поменяв под знаками сумм местами сначала индексы α и γ, а затем в полученном выражении индексы β и α. В результате выражение для полного потока тепла в смеси принимает вид

$$\mathbf{q} = \frac{5}{2} \sum_{\alpha=1}^{N} p_\alpha \mathbf{w}_\alpha - \lambda \nabla T - \sum_{\alpha=1}^{N} \sum_{\beta=1}^{N} \frac{n_\beta kT}{m_\alpha n [D_{\alpha\beta}]_1} D^T_{\alpha\beta} (\mathbf{w}_\alpha - \mathbf{w}_\beta) \tag{5.8}$$

Здесь

$$\lambda = \sum_{\alpha=1}^{N} \lambda_\alpha, \quad D^T_{\alpha\beta} = -\frac{\mu_{\alpha\beta}}{k} \left(\frac{6}{5} C^*_{\alpha\beta} - 1 \right) \lambda_\alpha \tag{5.9}$$

λ – полный коэффициент теплопроводности смеси, $D^T_{\alpha\beta}$ – коэффициент термодиффузии частиц сортов α и β [10, 41].

Выражение для коэффициента теплопроводности можно представить в виде отношения двух определителей порядка $N + 1$ и N

$$\lambda = -\frac{1}{|\Lambda^{11}|} \begin{vmatrix} \Lambda^{11}_{11} & \dots & \Lambda^{11}_{1N} & x_1 \\ & & & \vdots \\ \Lambda^{11}_{N1} & \dots & \Lambda^{11}_{NN} & x_N \\ x_1 & \dots & x_N & 0 \end{vmatrix} \tag{5.10}$$

Выражения для λ и $D^T_{\alpha\beta}$ соответствуют при этом результатам полного второго приближения МЧК [2, 3]. Они отличаются более простым видом от соответствующих величин, приводимых, например, в монографии [2], где коэффициенты теплопроводности λ и термодиффузии D_α^T (не путать с $D_{\alpha\beta}^T$) выражаются через отношение определителей порядка $2N + 1$ и $2N$, в то время как полученные выше выражения включают отношения определителей порядка $N + 1$ и N. Это связано с тем, что при вычислении коэффициентов переноса использовались [2] те члены разложения по полиномам Сонина, которые дают лишь первый (неисчезающий) вклад в эти коэффициенты. В частности, для получения ненулевого результата для коэффициента диффузии достаточно учесть лишь один член в разложении (соответствующий коэффициенту a_α^{10} в предлагаемой здесь схеме). Корректное вычисление коэффициентов λ и $D_{\alpha\beta}^T$ связано с учетом двух коэффициентов (a_α^{10} и a_α^{11} в рассматриваемой схеме).

Выше уже рассматривались выражения для парциального и полного тензора вязких напряжений. Они следуют из решения уравнений (3.4), в которых опущены производная по времени $d\pi_{\alpha ik}/dt$ и производные по координате от потока тепла. При учете выражения для $R_{\alpha ik}^{20}$ (3.7) эти уравнения можно представить в виде

$$p^2 \sum_{\beta=1}^{N} H_{\alpha\beta}^{00} \frac{\pi_{\beta ik}}{p_\beta} = -2p_0\xi_{ik} \tag{5.11}$$

где

$$\begin{aligned} H_{\alpha\alpha}^{00} &= \frac{x_\alpha^2}{[\eta_{\alpha\alpha}]_1} + \sum_{\beta\neq\alpha} \frac{2x_\alpha x_\beta}{(m_\alpha + m_\beta)n[D_{\alpha\beta}]_1}\left(1 + \frac{3}{5}\frac{m_\beta}{m_\alpha}A_{\alpha\beta}^*\right) \\ H_{\alpha\beta}^{00} &= -\frac{2x_\alpha x_\beta}{(m_\alpha + m_\beta)n[D_{\alpha\beta}]_1}\left(1 - \frac{3}{5}A_{\alpha\beta}^*\right), \quad \beta\neq\alpha \\ [\eta_{\alpha\alpha}]_1 &= \frac{5}{8}\frac{kT}{\Omega_{\alpha\alpha}^{22}} \end{aligned} \tag{5.12}$$

Коэффициенты $H_{\alpha\beta}^{00}$ определены так же как и ранее [2, 3], $[\eta_{\alpha\alpha}]_1$ – вязкость чистого газа, образованного из частиц сорта α, рассчитанная в первом приближении МЧК [2, 3].

Линейное соотношение для компонентов тензора вязких напряжений в смеси имеет вид

$$\pi_{ik} = -2\eta\varepsilon_{ik} \tag{5.13}$$

Здесь

$$\eta = \sum_{\alpha=1}^{N} \eta_\alpha = \sum_{\alpha=1}^{N}\sum_{\beta=1}^{N} x_\alpha x_\beta \frac{|H|_{\beta\alpha}}{|H|} \tag{5.14}$$

или

$$\eta = -\frac{1}{|H^{00}|}\begin{vmatrix} H_{11}^{00} & \dots & H_{1N}^{00} & x_1 \\ \vdots & & \vdots & \vdots \\ H_{N1}^{00} & \dots & H_{NN}^{00} & x_N \\ x_1 & \dots & x_N & 0 \end{vmatrix} \tag{5.15}$$

Полученное выражение полностью согласуется с результатом, соответствующим первому приближению МЧК [2, 3].

Не будем выписывать здесь поправки второго приближения в уравнениях переноса массы компонентов, возникающие при подстановке парциальных приведенных потоков тепла (5.4) в уравнения (4.1) или (4.4). Соответствующие результаты вместе с выражениями для потоков тепла и тензора вязких напряжений рассматриваются в следующем разделе в рамках более высоких приближений по числу полиномов Сонина в разложении функций распределения.

6. Высшие приближения. Более высокие приближения метода моментов соответствуют учету в разложении функции распределения (2.8) большего числа моментов, чем рассмотренная выше совокупность величин, отвечающая приближению $13N$ моментов (3.1). Добавочные коэффициенты a_α^{mn} (при $m = 1, n > 1$ и $m = 2, n > 0$) связаны с моментами функции распределения, уже не имеющими явного физического смысла, однако на каждом новом этапе приближения, когда ограничиваемся конечным числом членов разложения, уравнения для этих коэффициентов входят в полную замкнутую систему уравнений наряду с уравнениями для $a_{\alpha i}^{10}$, $a_{\alpha ik}^{20}$ и $a_{\alpha i}^{11}$ или $\mathbf{w}_\alpha$, $\pi_{\alpha ik}$ и $\mathbf{h}_\alpha$ и тем самым уточняют определение этих величин в каждом порядке приближения. Действительно, решение такой системы позволяет найти выражения для представляющих интерес диффузионных скоростей, потоков тепла и тензора вязких напряжений с учетом вклада от коэффициентов разложения более высокого порядка.

Сопоставление с разложениями функции распределения, используемыми в МЧЭ [1–3], показывает, что на уровне первого приближения по числу Кнудсена λ/L_0 эквивалентное разложение для f_α в методе моментов должно выбираться в виде

$$f_\alpha = f_\alpha^{(0)}\left(1 + \sum_{n=0}^{\infty} \sigma_{1n} a_{\alpha i}^{1n} H_{\alpha i}^{1n}(\xi_\alpha) + \sum_{n=0}^{\infty} \sigma_{2n} a_{\alpha ik}^{2n} H_{\alpha ik}^{2n}(\xi_\alpha)\right) \tag{6.1}$$

т.е. включать тензорные полиномы $P^{(m)}$ не выше второго ранга ($m < 3$). Разложение для ϕ_α с учетом определения полиномов H_α^{mn} (2.9) можно тогда представить как

$$\phi_\alpha = \sum_{n=0}^{\infty} (-2)^n n! \left[\sigma_{1n} a_{\alpha i}^{1n} S_{3/2}^n\left(\frac{1}{2}\xi_\alpha^2\right)\xi_i + \sigma_{2n} a_{\alpha ik}^{2n} S_{5/2}^n\left(\frac{1}{2}\xi_\alpha^2\right)\left(\xi_i\xi_k - \frac{1}{3}\right)\xi^2\delta_{ik}\right] \tag{6.2}$$

Использование произвольного числа полиномов Сонина в разложении (6.2) позволяет проводить расчет потоков и соответствующих коэффициентов переноса в любом заданном приближении. Заметим, что для установления полного соответствия между методом Чепмена–Энскога и методом моментов Грэда на уровне барнеттовского и следующих приближений к функции распределения может оказаться необходимым учет тензорных полиномов более высокого ранга по индексу m, например полиномов $P_{ijk}^{(3)}$. Этот вопрос, однако, требует специального обсуждения и здесь не рассматривается.

Система алгебраических уравнений для коэффициентов a_α^{mn} следует из общей системы уравнений (2.33), если в соответствии с проведенным выше анализом опустить в каждом из уравнений производные по времени и пространственные производные от соответствующих коэффициентов. При этом временные производные dn_α/dt, $d\mathbf{u}/dt$ и dT/dt в левой части уравнений заменяются с использованием уравнений сохранения (2.36)–(2.38), в которых также опускаются производные от диссипативных потоков (т.е. с помощью уравнений Эйлера). В результате левые части уравнений для скалярных коэффициентов разложения ($m = 0$, $n = 0{,}1$) обращаются в нуль. При $m = 1$ приходим к системе уравнений для векторных величин $\mathbf{a}_{\alpha i}^{1n}$, в число которых входят коэффициенты $\mathbf{a}_{\alpha i}^{10}$ и $\mathbf{a}_{\alpha i}^{11}$, связанные с представляющими интерес величинами $\mathbf{w}_\alpha$ и $\mathbf{h}_\alpha$

$$
\begin{aligned}
&\sum_\beta \sum_{l=0}^{\xi-1} C_{\alpha\beta}^{10l} \mathbf{a}_\beta^{1l} = -\gamma_\alpha^{-1/2} n \mathbf{d}_\alpha \\
&\sum_\beta \sum_{l=0}^{\xi-1} C_{\alpha\beta}^{11l} \mathbf{a}_\beta^{1l} = -5\gamma_\alpha^{-1/2} n_\alpha \nabla \ln T \\
&\sum_\beta \sum_{l=0}^{\xi-1} C_{\alpha\beta}^{1nl} \mathbf{a}_\beta^{1l} = 0, \quad 1 < n \le \xi - 1
\end{aligned}
\tag{6.3}
$$

Величина $\mathbf{d}_\alpha$ определена выражением (4.2).

При $m = 2$ получается система уравнений для коэффициентов $a_{\alpha ik}^{2n}$, в число которых входит коэффициент $a_{\alpha ik}^{20}$, связанный с парциальным тензором вязких напряжений $\pi_{\alpha ik}$

$$
\begin{aligned}
&\sum_\beta \sum_{l=0}^{\xi-1} C_{\alpha\beta}^{20l} a_{\beta ik}^{2l} = -2n_\alpha \varepsilon_{ik} \\
&\sum_\beta \sum_{l=0}^{\xi-1} C_{\alpha\beta}^{2nl} a_{\beta ik}^{2l} = 0, \quad 0 < n \le \xi - 1
\end{aligned}
\tag{6.4}
$$

Системы векторных и тензорных линейных алгебраических уравнений (6.3) и (6.4) могут быть разрешены относительно коэффициентов $\mathbf{a}_\gamma^{1l}$ и $a_{\gamma ik}^{2l}$ для любого конечного значения ξ. В результате находятся коэффициенты $\mathbf{a}_\alpha^{10}$, $a_{\alpha ik}^{20}$ и $\mathbf{a}_\alpha^{11}$ или параметры $\mathbf{w}_\alpha$, $\pi_{\alpha ik}$ и $\mathbf{h}_\alpha$ ("потоки", по терминологии термодинамики неравновесных процессов). Заметим, что рассмотренное выше приближение $13N$ моментов соответствует использованию первых двух уравнений (6.3) для коэффициентов $a_{\alpha i}^{10}$ и $a_{\alpha i}^{11}$ ($\xi = 2$) и одного уравнения (6.4) для коэффициента $a_{\alpha ik}^{20}$ ($\xi = 1$).

Введем вместо коэффициентов $C_{\alpha\beta}^{1nl}$ симметричные коэффициенты $q_{\alpha\beta}^{nl}$, которые определяются как

$$
q_{\alpha\beta}^{nl} = \frac{m_\alpha^{1/2} m_\beta^{1/2}}{nkT} (Q_{\ln l})^{-1} C_{\alpha\beta}^{\ln l} \tag{6.5}
$$

или

$$
q_{\alpha\beta}^{nl} = \frac{m_\alpha^{1/2} m_\beta^{1/2}}{nkT} [\delta_{\alpha\beta} \sum \hat{A}_{\alpha\gamma}^{\ln l} + \hat{B}_{\alpha\beta}^{\ln l}] \tag{6.6}
$$

где

$$\hat{A}^{\ln l}_{\alpha\beta} = n_\alpha n_\beta [S^l_{3/2}(W^2)\mathbf{W}, S^n_{3/2}(W^2)\mathbf{W}]'_{\alpha\beta}$$
$$\hat{B}^{\ln l}_{\alpha\beta} = n_\alpha n_\beta [S^l_{3/2}(W^2)\mathbf{W}, S^n_{3/2}(W^2)\mathbf{W}]''_{\alpha\beta} \tag{6.7}$$

С учетом определений (2.14) система уравнений (6.3) может быть переписана как

$$\sum_{\beta=1}^{N} q^{00}_{\alpha\beta}\mathbf{w}_\beta + \sum_{\beta=1}^{N} q^{01}_{\alpha\beta}\boldsymbol{\xi}_{\beta 1} + \sum_{\beta=1}^{N}\sum_{l=2}^{\xi-1} q^{0l}_{\alpha\beta}\boldsymbol{\xi}_{\beta l} = -\frac{3}{2}\mathbf{d}_\alpha \tag{6.8}$$

$$\sum_{\beta=1}^{N} q^{10}_{\alpha\beta}\mathbf{w}_\beta + \sum_{\beta=1}^{N} q^{11}_{\alpha\beta}\boldsymbol{\xi}_{\beta 1} + \sum_{\beta=1}^{N}\sum_{l=2}^{\xi-1} q^{1l}_{\alpha\beta}\boldsymbol{\xi}_{\beta l} = \frac{15}{4}x_\alpha \nabla \ln T \tag{6.9}$$

$$\sum_{\beta=1}^{N} q^{n0}_{\alpha\beta}\mathbf{w}_\beta + \sum_{\beta=1}^{N} q^{n1}_{\alpha\beta}\boldsymbol{\xi}_{\beta 1} + \sum_{\beta=1}^{N}\sum_{l=2}^{\xi-1} q^{nl}_{\alpha\beta}\boldsymbol{\xi}_{\beta l} = 0, \quad 1 < n \le \xi - 1 \tag{6.10}$$

Эта система уравнений должна быть дополнена условием

$$\sum_{\alpha=1}^{N} n_\alpha m_\alpha \mathbf{w}_\alpha = 0 \tag{6.11}$$

В уравнениях (6.8)–(6.10) используются новые переменные

$$\boldsymbol{\xi}_{\beta l} = \frac{3}{2} Q_{\ln l}\gamma_\beta^{-1/2}\mathbf{a}^{1l}_\beta \tag{6.12}$$

в частности

$$\boldsymbol{\xi}_{\beta 0} = \mathbf{w}_\beta, \quad \boldsymbol{\xi}_{\beta 1} = -\frac{2}{5}\mathbf{h}_\beta = -\frac{2}{5}\left(\mathbf{q}_\beta - \frac{5}{2}p_\beta \mathbf{w}_\beta\right) \tag{6.13}$$

Система уравнений (6.8)–(6.10) полностью совпадает с уравнениями модифицированного МЧК, полученными ранее [38, 4, 5]. Для случая $\xi = 2$ эта система соответствует уравнениям для переменных $\mathbf{w}_\alpha$ и $\mathbf{h}_\alpha$, полученным в разд. 4 и 5 в приближении 13N моментов.

Решение системы уравнений (6.8)–(6.10) в общем случае приводит к выражениям для диффузионного потока $\mathbf{J}_\alpha = \rho_\alpha \mathbf{w}_\alpha$ и приведенного полного потока тепла $\mathbf{h} = \sum_{\alpha=1}^{N} \mathbf{h}_\alpha$, которые линейно зависят от "термодинамических сил" $\mathbf{d}_\beta$ и $\nabla \ln T$

$$\mathbf{J}_\alpha = -\rho_\alpha \sum_{\beta=1}^{N} D_{\alpha\beta}(\xi)\mathbf{d}_\beta - \rho_\alpha D_{T\alpha}(\xi)\nabla \ln T \tag{6.14}$$

$$\mathbf{h} = \mathbf{q} - \frac{5}{2}kT\sum_{\alpha=1}^{N} n_\alpha \mathbf{w}_\alpha = -\lambda'(\xi)\nabla T - p\sum_{\alpha=1}^{N} D_{T\alpha}\mathbf{d}_\alpha \tag{6.15}$$

Здесь $D_{\alpha\beta}$ и $D_{T\alpha}$ – коэффициенты диффузии и термодиффузии многокомпонентной смеси [2, 3], λ' – "мгновенный" коэффициент теплопроводности смеси (для случая, когда все диффузионные термодинамические силы равны нулю).

Соотношения (6.14) и (6.15) соответствуют известным результатам стандартной процедуры МЧЭ [2, 3]. Коэффициенты пропорциональности в этих соотношениях (коэффициенты переноса), определяемые в произвольном приближении по ξ, записываются в виде отношений определителей порядка $N\xi + 1$ и $N\xi$, составленных из элементов $q_{\alpha\beta}^{nl}$.

Был предложен [38, 4, 5] другой алгоритм решения систем уравнений (6.8)–(6.10), который приводит к записи уравнений для диффузионных скоростей компонентов в форме Стефана–Максвелла и к выражению для полного потока тепла, линейно зависящему от градиента температуры и диффузионных скоростей компонентов $\mathbf{w}_\beta$ (а не диффузионных сил $\mathbf{d}_\beta$). При таком подходе сначала решается система уравнений (6.9)–(6.10), которые можно представить как

$$\sum_{\beta=1}^{N}\sum_{l=1}^{\xi-1} q_{\alpha\beta}^{nl}\xi_{\beta l} = \frac{15}{4}x_\alpha \nabla \ln T \delta_{n1} - \sum_{\beta=1}^{N} q_{\alpha\beta}^{n0}\mathbf{w}_\beta \qquad \alpha = 1, \ldots, N; \quad n = 1, \ldots, \xi - 1 \tag{6.16}$$

Выражения для приведенного парциального потока тепла записываются в этом случае в виде

$$\mathbf{h}_\alpha = -\frac{5}{2}n_\alpha kT\xi_{\alpha 1} = -\lambda_\alpha \nabla T + nkT\sum_{\beta=1}^{N} k_{T\alpha\beta}\mathbf{w}_\beta \tag{6.17}$$

где

$$\lambda_\alpha = -\frac{75}{8}\frac{nk}{|q|}x_\alpha \begin{vmatrix} 0 & 0 & \ldots & \delta_{\alpha s} & 0 & \ldots \\ x_r & q_{rs}^{11} & \ldots & q_{rs}^{1n} & q_{rs}^{1,n+1} & \ldots \\ 0 & q_{rs}^{21} & \ldots & q_{rs}^{2n} & q_{rs}^{2,n+1} & \ldots \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \end{vmatrix} \tag{6.18}$$

$$k_{T\alpha\beta} = -\frac{5}{2}\frac{1}{|q|}x_\alpha \begin{vmatrix} 0 & 0 & \ldots & \delta_{\alpha s} & 0 & \ldots \\ q_{r\beta}^{10} & q_{rs}^{11} & \ldots & q_{rs}^{1n} & q_{rs}^{1,n+1} & \ldots \\ q_{r\beta}^{20} & q_{rs}^{21} & \ldots & q_{rs}^{2n} & q_{rs}^{2,n+1} & \ldots \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \end{vmatrix} \tag{6.19}$$

Здесь $q_{\alpha s}^{mn}$ означает квадратную матрицу порядка N с элементами $q_{\alpha\beta}^{mn}$, $\delta_{\alpha s}$ – соответствующую строку из символов Кронекера $\delta_{\alpha\beta}$, x_r – столбец значений x_α (α, $\beta = 1, \ldots, N$). Обозначение $|q|$ соответствует определителю системы уравнений (6.16) с элементами q_{rs}^{mn}.

Заметим, что коэффициенты $q_{\alpha\beta}^{mn}$ удовлетворяют условиям [5]

$$q_{\alpha\beta}^{mn} = q_{\beta\alpha}^{mn}, \quad \sum_{\alpha=1}^{N} q_{\alpha\beta}^{0n} = 0, \quad \sum_{\varepsilon=1}^{N} q_{\alpha\beta}^{m0} = 0 \tag{6.20}$$

Последние два соотношения следуют из закона сохранения импульса смеси.

Для полного приведенного потока тепла в любом приближении по ξ имеем

$$\mathbf{h} = -\lambda(\xi)\nabla T + nkT\sum_{\alpha=1}^{N} k_{T\alpha}(\xi)\mathbf{w}_\alpha \tag{6.21}$$

Коэффициент теплопроводности λ и термодиффузионные отношения $k_{T\alpha}$ определены выражениями

$$\lambda(\xi) = \sum_{\alpha=1}^{N}\lambda_\alpha = -\frac{75nk}{8\,|q|}\begin{vmatrix} 0 & x_s & 0 & \dots \\ x_r & q_{rs}^{11} & q_{rs}^{12} & \dots \\ 0 & q_{rs}^{21} & q_{rs}^{22} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix} \tag{6.22}$$

$$k_{T\alpha}(\xi) = \sum_{\beta=1}^{N} k_{T\alpha\beta} = -\frac{5}{8}\frac{1}{|q|}\begin{vmatrix} 0 & x_s & 0 & \dots \\ q_{r\alpha}^{10} & q_{rs}^{11} & q_{rs}^{12} & \dots \\ q_{r\alpha}^{20} & q_{rs}^{21} & q_{rs}^{22} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix} \tag{6.23}$$

Значения термодиффузионных отношений $k_{T\alpha}$ в силу условий (6.20) не являются независимыми, они связаны соотношением

$$\sum_{\alpha=1}^{N} k_{T\alpha} = 0 \tag{6.24}$$

С учетом определения (2.15) и условия (6.20) выражение для полного потока тепла в смеси можно представить в виде

$$\mathbf{q} = \frac{5}{2}kT\sum_{\alpha=1}^{N} n_\alpha\mathbf{w}_\alpha - \lambda(\xi)\nabla T + nkT\sum_{\alpha=1}^{N} k_{T\alpha}(\xi)\mathbf{w}_\alpha \tag{6.25}$$

Уравнения Стефана–Максвелла получаются в результате подстановки в уравнения (6.8) решений уравнений (6.9), (6.10). Первый член слева в уравнении (6.8) преобразуется с помощью выражения для $q_{\alpha\beta}^{00}$ [2, 3]

$$q_{\alpha\beta}^{00} = \frac{3}{2}\delta_{\alpha\beta}\sum_{\gamma=1}^{N}\frac{x_\alpha x_\gamma}{[D_{\alpha\gamma}]_1} - \frac{3}{2}\frac{x_\alpha x_\beta}{[D_{\alpha\beta}]_1} \tag{6.26}$$

Окончательный результат записывается в виде [40]

$$-p\mathbf{d}_\alpha = \sum_{\beta\neq\alpha}^{N}\frac{n_\alpha n_\beta kT}{n[D_{\alpha\beta}]_1 f_{\alpha\beta}}(\mathbf{w}_\alpha - \mathbf{w}_\beta) + pk_{T\alpha}\nabla\ln T \tag{6.27}$$

Здесь $f_{\alpha\beta}(\xi) = [1 - D_{\alpha\beta}(\xi)]^{-1}$ – поправка более высокого приближения к коэффициенту бинарной диффузии $[D_{\alpha\beta}]_1$, причем

$$\Delta_{\alpha\beta}(\xi) = \frac{2}{3}\frac{n^2[D_{\alpha\beta}]_1}{n_\alpha n_\beta |q|}\begin{vmatrix} 0 & q_{\beta s}^{01} & q_{\beta s}^{02} & \dots \\ q_{r\alpha}^{10} & q_{rs}^{11} & q_{rs}^{12} & \dots \\ q_{r\alpha}^{20} & q_{rs}^{21} & q_{rs}^{22} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix} \tag{6.28}$$

В отличие от обычных выражений для диффузионных потоков и потока тепла (6.14) и (6.15), получаемых в рамках МЧЭ и соответствующих представлению "потоков" через "силы", уравнения диффузии в форме Стефана–Максвелла (6.27) и выражение для потока тепла (6.25) соответствуют системе уравнений переноса, разрешенной относительно "сил" через "потоки" в любом приближении по ξ. Преимущество выражений, получаемых при таком подходе, заключается в том, что коэффициенты переноса в них выражены через отношения определителей меньшего порядка, а именно отношения детерминантов порядка $N(\xi - 1) + 1$ и $N(\xi - 1)$, что заметно упрощает расчет соответствующих величин. Кроме того, выражение для q в форме (6.25) более предпочтительно при конкретном использовании, поскольку в отличие от "мгновенного" коэффициента λ' "истинный" коэффициент теплопроводности λ поддается прямому экспериментальному измерению. Это связано с тем, что соответствующее экспериментальным условиям стационарное состояние в смеси устанавливается лишь после того, как перенос массы компонента за счет градиента температуры (термодиффузия) уравновешивается массовым диффузионным потоком за счет возникшего градиента концентрации. Полные диффузионные потоки при этом обращаются в нуль, и поток тепла определяется выражением (6.25), соответствующим закону Фурье с "истинным" коэффициентом теплопроводности λ.

Заметим, что коэффициенты $q^{nl}_{\alpha\beta}$ связаны с известными коэффициентами $\Lambda^{nl}_{\alpha\beta}$, используемыми в монографии [3] соотношением

$$\Lambda^{nl}_{\alpha\beta} = \frac{8}{75}\frac{T}{p}q^{nl}_{\alpha\beta} \tag{6.29}$$

Запишем систему уравнений (6.8)–(6.9) для случая $\xi = 2$, используя соотношение (6.29)

$$\begin{aligned} \sum_{\beta=1}^{N}\Lambda^{00}_{\alpha\beta}\mathbf{w}_\beta - \frac{2}{5}\sum_{\beta=1}^{N}\Lambda^{01}_{\alpha\beta}\frac{\mathbf{h}_\beta}{p_\beta} &= -\frac{4}{25}\frac{T}{p}\mathbf{d}_\alpha \\ \sum_{\beta=1}^{N}\Lambda^{10}_{\alpha\beta}\mathbf{w}_\beta - \frac{2}{5}\sum_{\beta=1}^{N}\Lambda^{11}_{\alpha\beta}\frac{\mathbf{h}_\beta}{p_\beta} &= \frac{2}{5}\frac{T}{p}x_\alpha\nabla\ln T \end{aligned} \tag{6.30}$$

Коэффициенты $\Lambda^{11}_{\alpha\beta}$ определены выражениями (5.2). Для коэффициентов $\Lambda^{00}_{\alpha\beta}$ и $\Lambda^{01}_{\alpha\beta} = \Lambda^{10}_{\alpha\beta}$ имеем [3]

$$\Lambda^{00}_{\alpha\alpha} = \frac{4}{25}\sum_{\beta\neq\alpha}\frac{x_\alpha x_\beta}{nk[D_{\alpha\beta}]_1}; \quad \Lambda^{00}_{\alpha\beta} = -\frac{4}{25}\frac{x_\alpha x_\beta}{nk[D_{\alpha\beta}]_1}, \quad \alpha\neq\beta \tag{6.31}$$

$$\begin{aligned} \Lambda^{01}_{\alpha\alpha} &= -\frac{2}{5}\sum_{\beta\neq\alpha}\frac{x_\alpha x_\beta}{nk[D_{\alpha\beta}]_1}\frac{\mu_{\alpha\beta}}{m_\alpha}\left(\frac{6}{5}C^*_{\alpha\beta} - 1\right) \\ \Lambda^{10}_{\alpha\beta} &= -\frac{2}{5}\frac{x_\alpha x_\beta}{nk[D_{\alpha\beta}]_1}\frac{\mu_{\alpha\beta}}{m_\beta}\left(\frac{6}{5}C^*_{\alpha\beta} - 1\right), \quad \alpha\neq\beta \end{aligned} \tag{6.32}$$

Легко обнаружить, что уравнения (6.30) полностью эквивалентны уравнениям (4.1) и (5.1), полученным ранее в приближении $13N$ моментов. Соответственно совпадают и выражения для коэффициентов теплопроводности и термодиффузии. При этом термодиффузионное отношение $k_{T\alpha}$ связано с введенными в предыдущем параграфе коэффициентами термодиффузии частиц сорта α и β соотношением

$$k_{T\alpha} = \sum_{\beta=1}^{N} \frac{n_\alpha n_\beta}{n^2[D_{\alpha\beta}]_1}\left(\frac{D^T_{\alpha\beta}}{m_\alpha n_\alpha} - \frac{D^T_{\beta\alpha}}{m_\beta n_\beta}\right) =$$
$$= -\frac{T}{p}\sum_{\beta=1}^{N} \frac{\mu_{\alpha\beta} n_\alpha n_\beta}{n^2[D_{\alpha\beta}]_1}\left(\frac{6}{5}C^*_{\alpha\beta} - 1\right)\left(\frac{\lambda_\alpha}{m_\alpha n_\alpha} - \frac{\lambda_\beta}{m_\beta n_\beta}\right) \tag{6.33}$$

Обратимся теперь к уравнениям для определения парциальных тензоров вязких напряжений. Преобразуем коэффициенты в уравнениях (6.4) с помощью соотношения

$$\bar{q}^{nl}_{\alpha\beta} = \frac{1}{n^2}(Q_{2nl})^{-1} C^{2nl}_{\alpha\beta} \tag{6.34}$$

или

$$\bar{q}^{nl}_{\alpha\beta} = \frac{1}{n^2}(\delta_{\alpha\beta}\sum \tilde{A}^{2nl}_{\alpha\gamma} + \tilde{B}^{2nl}_{\alpha\beta}) \tag{6.35}$$

где

$$\begin{aligned} \tilde{A}^{2nl}_{\alpha\beta} &= n_\alpha n_\beta\left[S^l_{5/2}(W^2)\left(W_iW_k - \frac{1}{3}\delta_{ik}W^2\right), S^n_{5/2}(W^2)\left(W_iW_k - \frac{1}{3}\delta_{ik}W^2\right)\right]'_{\alpha\beta} \\ \tilde{B}^{2nl}_{\alpha\beta} &= n_\alpha n_\beta\left[S^l_{5/2}(W^2)\left(W_iW_k - \frac{1}{3}\delta_{ik}W^2\right), S^n_{5/2}(W^2)\left(W_iW_k - \frac{1}{3}\delta_{ik}W^2\right)\right]''_{\alpha\beta} \end{aligned} \tag{6.36}$$

Уравнения (6.4) перепишутся тогда как

$$\begin{aligned} &\sum_{\beta=1}^{N} \bar{q}^{00}_{\alpha\beta}\sigma^{(0)}_{\beta ik} + \sum_{\beta=1}^{N}\sum_{l=1}^{\xi-1} \bar{q}^{0l}_{\alpha\beta}\sigma^{(l)}_{\beta ik} = -5x_\alpha\varepsilon_{ik} \\ &\sum_{\beta=1}^{N} \bar{q}^{n0}_{\alpha\beta}\sigma^{(0)}_{\beta ik} + \sum_{\beta=1}^{N}\sum_{l=1}^{\xi-1} \bar{q}^{nl}_{\alpha\beta}\sigma^{(0)}_{\beta ik} = 0, \quad 0 < n \le \xi - 1 \end{aligned} \tag{6.37}$$

где

$$\sigma^{(l)}_{\beta ik} = \frac{5}{2}nkTQ_{2nl}a^{2l}_\beta \tag{6.38}$$

Парциальный тензор вязких напряжений связан с $\sigma^{(0)}_{\alpha ik}$ соотношением $\pi_{\alpha ik} = x_\alpha\sigma^{(0)}_{\alpha ik}$. Решение уравнений (6.37) дает

$$\pi_{\alpha ik} = -2\eta_\alpha\varepsilon_{ik}, \quad \pi_{ik} = -2\eta\varepsilon_{ik} \tag{6.39}$$

где парциальный и полный коэффициенты вязкости определяются выражениями

$$\eta_\alpha(\xi) = -\frac{5}{2}\frac{1}{|q|}x_\alpha \begin{vmatrix} 0 & 0 & \dots & \delta_{\alpha s} & 0 & \dots \\ x_r & \bar{q}^{00}_{rs} & \dots & \bar{q}^{0n}_{rs} & \bar{q}^{0,n+1}_{rs} & \dots \\ 0 & \bar{q}^{10}_{rs} & \dots & \bar{q}^{1n}_{rs} & \bar{q}^{1,n+1}_{rs} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix} \tag{6.40}$$

$$\eta(\xi) = \sum_{\alpha=1}^{N} \eta_\alpha = -\frac{5}{2}\frac{1}{|q|}\begin{vmatrix} 0 & x_s & 0 & \ldots \\ x_r & \bar{q}_{rs}^{00} & \bar{q}_{rs}^{01} & \ldots \\ 0 & \bar{q}_{rs}^{10} & \bar{q}_{rs}^{11} & \ldots \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \end{vmatrix} \qquad (6.41)$$

Коэффициенты $\bar{q}_{\alpha\beta}^{nl}$ связаны с известными коэффициентами $H_{\alpha\beta}^{nl}$ Ферцигера–Капера [3] соотношением

$$\bar{q}_{\alpha\beta}^{nl} = \frac{5}{2}\frac{p}{kT}H_{\alpha\beta}^{nl} \qquad (6.42)$$

Для случая $\xi = 1$ уравнения для определения $\pi_{\alpha ik}$ принимают вид

$$\sum H_{\alpha\beta}^{00}\frac{\pi_{\beta ik}}{x_\beta} = -2x_\alpha\varepsilon_{ik} \qquad (6.43)$$

что полностью соответствует уравнениям (5.10), полученным в приближении 13N моментов.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (03-01-00424, 03-01-00542). Минобразования России (Е02-4.0-52), в рамках “Государственная поддержка ведущих научных школ” (НШ-1899.2003.1) и программы “Университеты России” (015.04.01.049).

ЛИТЕРАТУРА

1. *Chapman S., Cowling T.G.* The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases. Cambridge: Univ. Press, 1952 = *Чепмен С., Каулинг Т.* Математическая теория неоднородных газов. М.: Изд-во иностр. лит., 1960. 510 с.
2. *Hirschfelder J.O., Curtiss C.F., Bird R.B.* Molecular Theory of Gases and Liquids. N.Y.: Wiley; L.: Chapman and Hall, 1954 = *Гиршфелдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р.* Молекулярная теория газов и жидкостей. М.: Изд-во иностр. лит., 1962. 929 с.
3. *Ferziger J.H., Kaper Y.G.* Mathematical Theory of Transport Processes in Gases. Amsterdam; London. North-Holland, 1972 = *Ферцигер Дж., Капер Г.* Математическая теория процессов переноса в газах. М.: Мир, 1976. 554 с.
4. *Колесников А.Ф., Тирский Г.А.* Гидродинамические уравнения и уравнения переноса для ионизированных многокомпонентных двухтемпературных смесей газов // Модели в механике сплошной среды. Новосибирск: Изд-во ИТПМ СО АН СССР, 1979. С. 114–134.
5. *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.
6. *Wang Chang C.S., Uhlenbeck G.E., de Boer J.* The heat conductivity and viscosity of polyatomic gases // Studies Statistical Mechanics / Ed. J. de Boer and C.E. Uhlenbeck. Amsterdam: North-Holland, 1964. V. 2. P. 243–268.
7. *Жданов В.М., Алиевский М.Я.* Процессы переноса и релаксации в молекулярных газах. М.: Наука, 1989. 335 с.
8. *McCourt F.R.W., Beenakker J.J.M., Kohler W.E., Kuscer I.* Nonequilibrium phenomena in polyatomic gases. Oxford: Clarendon Press, V. 1. 1990. 600 p.; V. 2. 1991. 350 p.
9. *Grad H.* On the kinetic theory of rarefied gases // Comm. Pure and Appl. Math. 1949. V. 2. N 4. P. 331–407.

10. *Жданов В.М.* Явления переноса в многокомпонентной плазме. М.: Энергоиздат, 1982. 177 с.
11. *Zhdanov V.M.* Transport Processes in Multicomponent Plasma. L.; N.Y.: Taylor and Francis, 2002. 296 p.
12. *Mitchner M., Kruger Jr. C.H.* Partially ionized gases. N.Y.: Wiley, 1973 = *Митчнер М., Кругер Ч.* Частично ионизованные газы. М.: Мир, 1976. 496 с.
13. *Devoto R.S.* Transport properties of ionized monatomic gases // Phys. Fluids. 1966. V. 9. N 6. P. 1230–1240.
14. *Devoto R.S.* Transport coefficients of partially ionized argon // Phys. Fluids. 1967. V. 10. N 2. P. 354–364.
15. *Hochstim A.R., Massel G.* A calculations of transport coefficients in a ionized gases // Kinetic Processes in Gases and Plasma / Ed. A.R. Hochstim. N.Y., L.: Acad. Press, 1969. P. 141–255.
16. *Montgomery D.C., Tidman D.A.* Plasma Kinetic Theory. N.Y.: McGraw-Hill, 1964. 293 p.
17. *Соколова И.А.* Коэффициенты переноса воздуха в области температур от 3 000 до 25 000 K и давлений 0.1, 1, 10, 100 атм. // ПМТФ. 1973. № 2. С. 80–90.
18. *Соколова И.А.* Коэффициенты переноса и интегралы столкновений воздуха и его компонент // Аэрофизические исследования. Новосибирск: Изд-во ИТПМ СО АН СССР, 1974. Вып. 4. С. 39–104.
19. *Spitzer L. Jr.* Physics of Fully Ionized Gases. N.Y.-L.: Intersci., 1962. 182 p.
20. *Брагинский С.И.* Явления переноса в плазме // Вопросы теории плазмы. М.: Атомиздат, 1963. Вып. 1. С. 183–272.
21. *Devoto R.S.* Simplified expressions for the transport properties of ionized monoatomic gases // Phys. Fluids. 1967. V. 10. N 10. P. 2105–2112.
22. *Li C.P., Devoto R.S.* Fifth and sixth approximations to the electron transport coefficients // Phys. Fluids. 1968. V. 11. N 2. P. 448–450.
23. *Ковалев В.Л., Крупнов А.А.* Численное моделирование химически неравновесного течения частично ионизованного воздуха в вязком ударном слое // Вестн. МГУ. Сер. 1. Математика, механика. 1996. № 2. С. 54–59.
24. *Тирский Г.А.* Анализ химического состава ламинарного многокомпонентного пограничного слоя на поверхности горящих пластиков // Космич. исследования. 1964. Т. 2. № 4. С. 570–594.
25. *Овсянников В.М., Тирский Г.А.* Разрушение осесимметричного тела вращения из материала сложного химического состава в потоке частично ионизованного воздуха // Изв. АН СССР. МЖГ. 1968. № 5. С. 100–110.
26. *Devoto R.S.* Transport coefficients of partially ionized hydrogen // J. Plasma Phys. 1968. V. 2. Pt 4. P. 617–631.
27. *Capitelli M., Devoto R.S.* Transport coefficients of high – temperature nitrogen // Phys. Fluids. 1973. V. 16. N 11. P. 1835–1841.
28. *Tirskiy G.A., Vasil'evskiy S.A., Kovalev V.L.* Elements separation in hypersonic flow over a body due to the multicomponent diffusion, nonequilibrium homogeneous chemical reactions and heterogeneous surface recombination // Proc. 23rd Symp. on Shock Waves. Univ. of Texas at Arlington. USA, 2001. P. 1018–1024.
29. *Тирский Г.А.* Континуальные модели в задачах гиперзвукового обтекания затупленных тел разреженным газом // ПММ. 1997. Т. 61. Вып. 6. С. 903–930.
30. *Rubin S.G., Tannehill J.C.* Parabolized/reduced Navier – Stokes computational techniques // Ann. Rev. Fluid Mech. 1992. V. 24. P. 117–144.
31. *Тирский Г.А.* Уравнения движения частично ионизованных многокомпонентных смесей газов в нормальной форме Коши с точными коэффициентами переноса // Науч. труды Ин-та механики МГУ. 1974. № 32. С. 6–22.
32. *Суслов О.Н.* Исследование уравнений химически неравновесного многокомпонентного пограничного слоя разностным методом с повышенной точностью аппроксимации // Гиперзвуковые течения при обтекании тел и в следах/Под ред. Г.Г. Черного и Г.А. Тирского. М.: Изд-во МГУ, 1983. С. 20–43.

33. *Ковалев В.Л., Суслов О.Н.* Разностный метод с повышенной точностью аппроксимации для интегрирования уравнений химически неравновесного многокомпонентного вязкого ударного слоя // Гиперзвуковые пространственные течения при наличии физико-химических превращений/Под ред. Г.А. Тирского и Э.А. Гершбейна. М.: Изд-во МГУ, 1981. С. 113–137.
34. *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 // ПМТФ. 1986. № 1. С. 68–79.
35. *Тирский Г.А.* Уравнения гидродинамики для химически равновесных течений многоэлементной плазмы с точными коэффициентами переноса // ПММ. 1999. Т. 63. Вып. 6. С. 899–922.
36. *Muckenfuss C., Curtiss C.F.* Thermal conductivity of multicomponent gas mixtures // J. Chem. Phys. 1958. V. 29. N 6. P. 1273–1277.
37. *Monchick L., Munn R.J., Mason E.A.* Thermal diffusion in polyatomic gases: a generalized Stefan – Maxwell diffusion equation // J. Chem. Phys. 1966. V. 45. N 8. P. 3051–3058.
38. *Генс А.В., Тирский Г.А.* Уравнения гидродинамики для многокомпонентных смесей с коэффициентами переноса в высших приближениях // Изв. АН СССР. МЖГ. 1972. № 6. С. 153–157.
39. *Колесников А.Ф.* Уравнения переноса для высокотемпературных ионизованных смесей газов в электромагнитных полях // Научн. труды Ин-та механики МГУ. 1975. № 39. С. 39–51.
40. *Колесников А.Ф., Тирский Г.А.* Соотношения Стефана–Максвелла для диффузионных потоков плазмы в магнитном поле // Изв. АН СССР. МЖГ. 1984. № 4. С. 148–154.
41. *Жданов В., Каган Ю., Сазыкин А.* Влияние вязкого переноса импульса на диффузию в газовой смеси // ЖЭТФ. 1962. Т. 42. № 3. С. 857–867.
42. *Жданов В.М.* Явления переноса в частично ионизованном газе // ПММ. 1962. Т. 26. Вып. 2. С. 280–288.
43. *Алиевский М.Я., Жданов В.М.* Уравнения переноса для неизотермической многосортной плазмы // ПМТФ. 1963. № 5. С. 11–17.
44. *Алиевский М.Я., Жданов В.М., Полянский В.А.* Тензор вязких напряжений и тепловой поток в двухтемпературном частично ионизованном газе // ПМТФ. 1964. № 3. С. 32–42.
45. *Жданов В.М., Юшманов П.Н.* Диффузия и перенос тепла в многокомпонентной полностью ионизованной плазме // ПМТФ. 1980. № 4. С. 24–34.
46. *Crad H.* Asymptotic theory of the Boltzmann equation // Phys. Fluids. 1963. V. 6. N 2. P. 147–181.
47. *de Groot S.R., Mazur P.* Non-Equilibrium Thermodynamics. Amsterdam: North-Holland, 1962 = де Гроот С.Р., Мазур П. Неравновесная термодинамика. М.: Мир, 1964. 456 с.

Москва
e-mail: tirskiy@imec.msu.ru

Поступила в редакцию
24.I.2003