



Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Е. Г. Колесниченко, В. М. Гефтер, О применении метода Энскога–Чепмена для вывода гидродинамических уравнений для химически реагирующих газов, *ТВТ*, 1974, том 12, выпуск 6, 1193–1200

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

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

Параметры загрузки:

IP: 3.238.202.29

11 ноября 2024 г., 17:13:35



УДК 533.7

**О ПРИМЕНЕНИИ МЕТОДА ЭНСКОГА — ЧЕПМЕНА
ДЛЯ ВЫВОДА ГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ
ДЛЯ ХИМИЧЕСКИ РЕАГИРУЮЩИХ ГАЗОВ**

Е. Г. Колесниченко, В. М. Гейфтер

Рассматриваемый подход к решению обобщенного уравнения Больцмана методом Энскога — Чепмена связан с выделением из функции распределения медленных переменных, что позволяет корректным образом ввести, кроме числа Кнудсена, другой характерный параметр задачи — соотношение времен гидродинамики и химической реакции. Полученные уравнения переноса (эквивалентные уравнениям Эйлера и Навье — Стокса) учитывают отклонение функции распределения нулевого приближения от локально максвелловской за счет неравновесной по концентрациям химической реакции. Отмечены связанные с этим увеличение числа независимых кинетических коэффициентов, например, бародиффузии, и отличие константы скорости реакции от равновесной уже в пулевом приближении.

I. Основная проблема, возникающая при рассмотрении данной задачи, заключается в том, что необходимо построить асимптотическое решение кинетического уравнения, пригодное в широкой области изменения дискретных и непрерывных квантовых чисел, характеризующих состояние отдельной молекулы.

Для описания химически реагирующих газов помимо задания функции распределения в области средних тепловых энергий, необходимой для вычисления ее низших моментов, соответствующих термодинамическим величинам и их потокам, следует достаточно точно знать ее и в области высоких энергий порядка энергии активации, в первую очередь, для вычисления скоростей реакции, которая может существенно изменить функцию распределения. Известно, что при больших энергиях вероятности процессов упругих и неупругих столкновений сравнимы по величине, в то время как в области тепловых энергий они имеют разный порядок. Это обстоятельство затрудняет явное введение в кинетическое уравнение малых параметров типа отношения этих вероятностей или соответствующих сечений столкновений.

Рассмотрим кинетическое уравнение вида обобщенного уравнения Больцмана:

$$\frac{\partial F_\alpha}{\partial t} + v_\alpha \frac{\partial F_\alpha}{\partial \mathbf{r}} = J_\alpha + \sum_i R_{\alpha i}, \quad \alpha = 1 \dots r. \quad (1)$$

Здесь F_α — одночастичная функция распределения для молекул сорта α ; v_α — скорость их центра масс; J_α описывает влияние столкновений, не сопровождающихся химической реакцией, $R_{\alpha i}$ учитывает i -ю химическую реакцию с участием частиц сорта α . В общем случае F_α зависит от всех квантовых чисел, характеризующих состояние молекул сорта α . В большинстве работ рассматривается модель, в которой внутренние степени свободы отсутствуют, тогда F_α — функция распределения по поступательным степеням свободы. Существует несколько способов вывода гидродинамических уравнений для рассматриваемых систем. Стандартными мето-

дами всегда можно ввести в (1) малый параметр ϵ , равный числу Кнудсена

$$\frac{\partial F_{\alpha}}{\partial t} + v_{\alpha} \frac{\partial F_{\alpha}}{\partial \mathbf{r}} = \frac{1}{\epsilon} (J_{\alpha} + R_{\alpha}). \quad (2)$$

Первый способ [1, 2] соответствует непосредственному разложению решения уравнения (2) по параметру ϵ методом Энского — Чепмена, при этом в нулевом приближении система «находится» в полном локальном равновесии, включая и химическое. Если в качестве гидродинамических переменных используются, как в работе [1], N_{λ} — концентрации атомов сорта λ , полная энергия и среднемассовая скорость смеси, то концентрации молекул определяются в каждом приближении как явные функции этих переменных.

Фактически данная схема соответствует предельному случаю, когда химические реакции протекают быстро по сравнению с другими процессами переноса.

При другом подходе [3] фактически принимается, что член R_{α} имеет порядок ϵ , т. е. методом Энского — Чепмена строится решение уравнения:

$$\frac{\partial F_{\alpha}}{\partial t} + v_{\alpha} \frac{\partial F_{\alpha}}{\partial \mathbf{r}} = \frac{1}{\epsilon} J_{\alpha} + R_{\alpha}. \quad (3)$$

Этот метод не накладывает ограничений на концентрации молекул, которые в данном случае являются медленными переменными, однако возникает вопрос о справедливости предположения о малости R_{α} , поскольку это может приводить к большим неточностям в определении скорости реакции. Кроме того, он в принципе не позволяет учесть влияние химических реакций на коэффициенты переноса, фигурирующие в уравнениях Навье — Стокса.

В работах [4] рассматривается так называемый обобщенный метод Энского — Чепмена, в котором разложение ведется по параметру, соответствующему отношению чисел упругих и приводящих к реакции столкновений. При этом уравнение первого приближения имеет вид

$$\frac{\partial F_{\alpha}}{\partial t} + v_{\alpha} \frac{\partial F_{\alpha}}{\partial \mathbf{r}_{\alpha}} + R_{\alpha}(F_{\alpha}^{(0)}) = J_{\alpha}(F_{\alpha}^{(1)}) + R_{\alpha}(F_{\alpha}^{(1)}). \quad (4)$$

Такой подход позволяет учесть с одной стороны отклонение состава от локально равновесного, а с другой — влияние химических реакций на коэффициенты переноса и отклонения констант скоростей от равновесных, расчеты которых, проведенные на его основе [5], дают хорошее согласие с точным решением кинетического уравнения. Однако обоснование данного метода и последовательный вывод уравнений переноса, который в этих работах отсутствует, сталкиваются с некоторыми трудностями, которые проявляются, например, при получении и интерпретации уравнения (4).

В работах [6, 7], выполненных практически тем же методом, в качестве гидродинамических переменных выбираются температура, среднемассовая скорость и плотности компонент смеси ρ_{α} . Это соответствует макроскопическому феноменологическому описанию смеси, однако число сумматорных инвариантов полного оператора столкновений не равно в данном случае числу медленных переменных, что препятствует последовательному применению стандартного метода Энского — Чепмена, так как в высших приближениях получаются ненулевые добавки к некоторым из медленных переменных.

Недостатки этих подходов связаны в первую очередь с тем, что в них не учитывается факт наличия в данной задаче, по крайней мере, двух независимых параметров, соответствующих отношению времени свободного пробега τ_0 к характерному времени гидродинамического течения τ_r и времени химической реакции τ_{α} . Это подтверждается и при анализе решения уравнения (1) методом Грэда [8].

Предлагаемый здесь подход к решению данной проблемы заключается в явном выделении медленных переменных, что позволяет ввести оба упомянутых выше параметра.

II. Введем локально равновесную функцию распределения

$$F_{\alpha}^{(0)} = (m_{\alpha}/2\pi kT)^{3/2} \exp[-m_{\alpha}c_{\alpha}^2/2kT],$$

где m_{α} — масса частиц сорта α ; $c_{\alpha} = v_{\alpha} - v_0$ — их скорость относительно скорости центра масс смеси, $v_0 = \frac{1}{\rho} \sum_{\alpha} m_{\alpha} \int v_{\alpha} F_{\alpha} dv_{\alpha}$; $T = \frac{2}{3nk} \sum_{\alpha} m_{\alpha} \int \frac{c_{\alpha}^2}{2} F_{\alpha} dv_{\alpha}$ — температура смеси. Здесь $\rho = \sum_{\alpha} m_{\alpha} n_{\alpha}$ и $n = \sum_{\alpha} n_{\alpha}$, где

$n_{\alpha} = \int F_{\alpha} dv_{\alpha}$ — концентрация частиц сорта α , массовая и числовая плотности смеси с $M = \sum_{\alpha} m_{\alpha}$. Будем искать решение уравнения (2) в виде

$F_{\alpha} = F_{\alpha}^{(0)} \varphi_{\alpha}$, где φ_{α} принадлежит гильбертову пространству функций с интегрируемым квадратом с весом $F_{\alpha}^{(0)}$. Тогда для φ_{α} имеем

$$\varepsilon \left(\frac{\partial \varphi_{\alpha}}{\partial t} + v_{\alpha} \frac{\partial \varphi_{\alpha}}{\partial \mathbf{r}} \right) = \frac{1}{F_{\alpha}^{(0)}} (J_{\alpha} + R_{\alpha}) - \varepsilon \varphi_{\alpha} \left(\frac{\partial}{\partial t} + v_{\alpha} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right) \ln F_{\alpha}^{(0)}. \quad (5)$$

Разобьем вектор-функцию $\{\varphi_{\alpha}\}$ на две части, одна из которых определяется через медленные переменные задачи, а другая принадлежит ортогональному дополнению подпространства, натянутого на вектора, соответствующие этим переменным, так что

$$\varphi = P\varphi + (1-P)\varphi = \varphi_1 + \varphi_2.$$

Ортогональный проектор P на указанное подпространство можно построить, ортогонализуя вектора $\{\delta_{\alpha i}\}$, $\{m_{\alpha} v_{\alpha}\}$ и $\{m_{\alpha} c_{\alpha}^2/2\}$, соответствующие n_{α} , v_0 , T , и нормируя их. Так ортонормированный базис имеет вид: $\psi_i = \{\delta_{\alpha i}\}$ ($i=1 \dots r$):

$$\psi_{r+j} = \frac{1}{\sqrt{MkT}} \{m_{\alpha} c_{\alpha j}\} \quad (j=1, 2, 3); \quad \psi_{r+i} = \frac{2}{3kT} \left\{ m_{\alpha} \frac{c_{\alpha}^2}{2} - \frac{3}{2} kT \right\}.$$

Тогда действие оператора P на вектор φ задается формулой

$$P\varphi = \sum_{i=1}^{r+4} \psi_i \langle \varphi, \psi_i \rangle, \text{ где скалярное произведение } \langle \varphi, \psi_i \rangle \text{ определяется как}$$

$$\sum_{\alpha} \int \psi_{\alpha} \varphi_{\alpha} F_{\alpha}^{(0)} dv_{\alpha}.$$

Систему, эквивалентную уравнению (5), можно построить, получив уравнения для гидродинамических переменных, эволюция которых полностью определяет поведение φ_1^* , и для функции φ_2 . Легко показать, что действуя оператором P на (5) и проводя несложные преобразования, получим уравнения сохранения медленных переменных, которые для рассматриваемой модели частиц без внутренних степеней свободы имеют тот же вид (за исключением «химических» членов), что и для смеси одноатомных газов [9]:

* Заметим, кстати, что φ_1 тождественна вектор-функции $\{n_{\alpha}\}$ из-за свойств оператора проектирования.

1. Уравнение непрерывности:

$$\frac{\partial n_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} (\mathbf{u}_\alpha + v_0) n_\alpha = \frac{1}{\varepsilon} r_\alpha, \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \rho v_0 = 0. \quad (6)$$

Последнее уравнение следует из равенств $\sum_\alpha m_\alpha r_\alpha = 0$ и $\sum_\alpha m_\alpha n_\alpha \mathbf{u}_\alpha = 0$, вытекающих из сохранения полной массы при химических реакциях и определения \mathbf{u}_α . Здесь $r_\alpha = \int R_\alpha dv_\alpha$ — скорость химической реакции: $\mathbf{u}_\alpha = \frac{1}{n_\alpha} \int \mathbf{c}_\alpha F_\alpha dv_\alpha = \langle v_\alpha \rangle - v_0$ — диффузионная скорость частиц сорта α .

2. Уравнение движения

$$\frac{\partial \mathbf{v}_0}{\partial t} + \mathbf{v}_0 \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} v_0 = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \hat{P}. \quad (7)$$

Здесь $\hat{P} = \sum_\alpha m_\alpha \int \mathbf{c}_\alpha \hat{c}_\alpha F_\alpha dv_\alpha$ — тензор давлений, и произведение $\mathbf{c}_\alpha \hat{c}_\alpha$

нужно понимать как диаду.

3. Уравнение энергии:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + v_0 \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right) \left(\frac{3}{2} nkT + \frac{\rho v_0^2}{2} \right) + \left(\frac{3}{2} nkT + \frac{\rho v_0^2}{2} \right) \operatorname{div} \mathbf{v}_0 + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \hat{P} \mathbf{v}_0 + \operatorname{div} \mathbf{q} = \frac{1}{\varepsilon} \sum_\alpha \int \frac{m_\alpha v_\alpha^2}{2} R_\alpha dv_\alpha \equiv \frac{1}{\varepsilon} Q. \quad (8)$$

Здесь $\mathbf{q} = \sum_\alpha m_\alpha \int \frac{\mathbf{c}_\alpha^2}{2} \mathbf{c}_\alpha F_\alpha dv_\alpha$ — вектор потока тепла; Q соответствует

тепловому эффекту химической реакции. Если внутреннюю энергию H_α отсчитывать от одного уровня для всех компонент, так что величина

$\sum_\alpha \left(\frac{m_\alpha v_\alpha^2}{2} + H_\alpha \right)$ будет сохраняться при химических реакциях, то выра-

жение для величины Q можно переписать в виде $Q = - \sum_\alpha H_\alpha r_\alpha$. Уравне-

ние (8) можно записать в виде уравнения для температуры

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v}_0 \frac{\partial T}{\partial \mathbf{r}} + \frac{2}{3nk} \hat{P} : \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \mathbf{v}_0 + \frac{2}{3nk} \operatorname{div} \mathbf{q} = \\ = -\frac{1}{\varepsilon} \frac{2}{3nk} \sum_\alpha r_\alpha \left(\frac{3}{2} kT + H_\alpha \right) + \frac{T}{n} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \sum_\alpha n_\alpha \mathbf{u}_\alpha. \end{aligned} \quad (9)$$

Для того чтобы ввести другой характерный параметр задачи, заметим, что в результате выделения $1/\varepsilon$ из правой части кинетического уравнения (2) безразмерный оператор \bar{R}_α имеет вид $\tau_0 R_\alpha$. Тогда величина скорости химической реакции r_α , возникающая при интегрировании правой части (2) по скоростям, имеет порядок $\tau_0/\tau_x \equiv \mu$. Следовательно, правые части (6) и (8) можно представить в виде $v \bar{r}_\alpha$ и $v \bar{Q}$, где $v \equiv \mu/\varepsilon = \tau_r/\tau_x$, $\bar{Q} = - \sum \bar{r}_\alpha H_\alpha$, а $\bar{r}_\alpha = 0$ (1), после чего обе части каждого из них будут выражены через функции, имеющие одинаковый порядок величины.

Таким образом, получаем систему уравнений, содержащую два параметра ν и ϵ

$$\frac{\partial n_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} (\mathbf{u}_\alpha + \mathbf{v}_0) n_\alpha = \nu \bar{r}_\alpha; \quad \frac{\partial \mathbf{v}_0}{\partial t} + \mathbf{v}_0 \frac{\partial \mathbf{v}_0}{\partial \mathbf{r}} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \hat{P}, \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v}_0 \frac{\partial T}{\partial \mathbf{r}} + \frac{2}{3nk} \left(\hat{P} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \mathbf{v}_0 + \text{div } \mathbf{q} \right) - \frac{T}{n} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \sum_\alpha n_\alpha \mathbf{u}_\alpha = \\ = -\nu \frac{2}{3nk} \sum_\alpha \bar{r}_\alpha \left(\frac{3}{2} kT + H_\alpha \right); \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \epsilon \left[\frac{\partial \Phi_2}{\partial t} + \nu \frac{\partial \Phi_2}{\partial \mathbf{r}} \right] = (1-P) \left\{ \frac{1}{F_\alpha^{(0)}} (J_\alpha + R_\alpha) \right\} - \\ - \epsilon (1-P) \left\{ \frac{\Phi_\alpha}{F_\alpha^{(0)}} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \nu \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right) F_\alpha^{(0)} \right\} - \epsilon \left[\frac{\partial P}{\partial t} + \nu \frac{\partial P}{\partial \mathbf{r}} \right] \Phi, \quad (11) \end{aligned}$$

которая получается, если подействовать на (5) оператором $(1-P)$. Здесь оператор $\nu \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}$ действует на вектор Φ по формуле

$$\left(\nu \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \Phi \right)_\alpha = \nu_\alpha \frac{\partial \Phi_\alpha}{\partial \mathbf{r}} \quad \text{и} \quad \left(\nu \frac{\partial P}{\partial \mathbf{r}} \right)_{\alpha\beta} = \nu_\alpha \frac{\partial P_{\alpha\beta}}{\partial \mathbf{r}}.$$

Как известно, гидродинамический режим соответствует малому ϵ .

При этом существует ситуация, когда ν имеет порядок $1/\epsilon$, что соответствует таким быстрым реакциям ($\tau_x \sim \tau_0$), для которых концентрации n_α не будут уже медленными переменными. В этом случае настоящий подход требует видоизменения в смысле выбора этих величин, что приводит к уравнениям для полной функции распределения Φ_α и N_λ , \mathbf{v}_0 , T в качестве гидродинамических переменных. Как указывалось выше, этот предельный случай описывается в рамках метода, развитого в [1], и поэтому останавливаться на нем не будем. Если же считать, что $\epsilon < 1/\nu$, то гидродинамические уравнения можно вывести разложением решения по ϵ , не обращая внимания на параметр ν . Предельные случаи, соответствующие локально равновесному ($\nu \gg 1$) и замороженному ($\nu \ll 1$) течениям, можно определить, раскладывая затем решения получающихся гидродинамических уравнений по $1/\nu$ и ν соответственно.

Будем искать решение системы (10), (11) методом Энского — Чепмена при помощи разложения по ϵ . Тогда в нулевом приближении из (11) получается уравнение

$$(1-P) \left\{ \frac{1}{F_\alpha^{(0)}} (J_\alpha + R_\alpha) \right\} = 0. \quad (12)$$

Это уравнение определяет $\Phi_2^{(0)}$ как функцию гидродинамических переменных. Раскрывая действие оператора P , его можно более подробно записать в виде

$$\begin{aligned} \frac{1}{F_\alpha^{(0)}} [J_\alpha + R_\alpha] (n_\alpha + \Phi_{2\alpha}^{(0)}) - \mu r_\alpha^{(0)} + \\ + \mu \frac{2}{3kT} \left(\frac{m_\alpha c_\alpha^2}{2} - \frac{3}{2} kT \right) \sum_\alpha r_\alpha^{(0)} \left(\frac{3}{2} kT + H_\alpha \right) \equiv A(\Phi_{2\alpha}^{(0)}) = 0. \quad (12a) \end{aligned}$$

Если изложенный выше формализм применить для изучения возмущения функции распределения в пространственно однородной системе след-

ствие протекания химических реакций, то можно показать, что уравнение нулевого приближения совпадает с уравнением (12а). Его решение можно искать модифицированным методом Ньютона — Канторовича [10]. Для этого рассмотрим уравнение

$$\varphi_2^{(0)} = \varphi_2^{(0)} - [J'(\{n_\alpha F_\alpha^{(0)}\})]^{-1} A(\varphi_2^{(0)}), \quad (13)$$

где $J'(\{n_\alpha F_\alpha^{(0)}\})$ — линеаризованный оператор упругих столкновений. Оператор $J'(\{n_\alpha F_\alpha^{(0)}\})$ обладает ограниченным обратным оператором в подпространстве функций вида $(1-P)\psi$, поэтому решение уравнения (13) будет и решением уравнения (12а). Будем решать (13) методом итераций, полагая

$$\varphi_{2,k+1}^{(0)} = \varphi_{2,k}^{(0)} - [J'(\{n_\alpha F_\alpha^{(0)}\})]^{-1} A(\varphi_{2,k}^{(0)}). \quad (14)$$

Если в качестве нулевого приближения взять $\varphi_{2,0}^{(0)} = 0$, получим

$$\varphi_{2,1}^{(0)} = [J'(\{n_\alpha F_\alpha^{(0)}\})]^{-1} (P-1) R(\{n_\alpha F_\alpha^{(0)}\}) / \{F_\alpha^{(0)}\}$$

или

$$J'(\{n_\alpha F_\alpha^{(0)}\}) \varphi_{2,1}^{(0)} = (P-1) R(\{n_\alpha F_\alpha^{(0)}\}) / \{F_\alpha^{(0)}\}. \quad (15)$$

Это уравнение аналогично уравнению первого приближения, получающегося при применении метода, развитого в [3], к пространственно однородной системе. Если вместо $J'(\{n_\alpha F_\alpha^{(0)}\})$ в (13) взять оператор $(1-P)I'(1-P)$, где I' — полный оператор столкновений, $I_\alpha = J_\alpha + R_\alpha$, линеаризованный с помощью локально равновесной функции распределения с произвольными концентрациями, и положить $\varphi_{2,0}^{(0)} = 0$, то получающееся в первом приближении уравнение

$$(1-P)I'(\{n_\alpha F_\alpha^{(0)}\}) \varphi_{2,1}^{(0)} = (P-1) R(\{n_\alpha F_\alpha^{(0)}\}) / \{F_\alpha^{(0)}\}, \quad (16)$$

как легко убедиться, аналогично (4). Если при этом концентрации n_α соответствуют локальному химическому равновесию, то уравнение (16) совпадает с уравнением, использованным в [7].

Решение уравнения (12а) является скалярной функцией c_α и, следовательно, зависит только от энергии. Вычисляя с такой функцией скорости реакций, диффузионные скорости, тензор давлений и тепловой поток, получим гидродинамические уравнения нулевого приближения. Легко показать, что получающаяся система имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} n_\alpha \mathbf{v}_0 = \nu r_\alpha^{(0)}, \quad \frac{\partial \mathbf{v}_0}{\partial t} + \mathbf{v}_0 \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \mathbf{v}_0 = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial \mathbf{r}}, \quad (17) \\ \frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v}_0 \frac{\partial T}{\partial \mathbf{r}} + \frac{2}{3nk} P \operatorname{div} \mathbf{v}_0 = -\frac{2}{3nk} \nu \sum_{\alpha} r_\alpha^{(0)} \left(\frac{3}{2} kT + H_\alpha \right). \end{aligned}$$

Здесь давление определяется уравнением состояния идеального газа $P = nkT$, хотя парциальные давления уравнениями $P_\alpha = n_\alpha kT$ уже не определяются. Таким образом, получаемая в этом приближении система гидродинамических уравнений имеет вид системы уравнений Эйлера, однако в отличие от других способов вывода этих уравнений константы скоростей реакций в уравнениях (17) являются неравновесными. Это обстоятельство может быть весьма важным, так как расхождение между равновесной и неравновесной константами может достигать нескольких порядков.

Рассмотрим теперь первое приближение. Уравнение для $\varphi_2^{(1)}$ имеет вид

$$(1-P) \left\{ \frac{1}{F_\alpha^{(0)}} [J_\alpha + R_\alpha]' (F_\alpha^{(0)} \varphi_\alpha^{(0)}) \varphi_\alpha^{(1)} \right\} = \frac{\partial \varphi_2^{(0)}}{\partial t} + v \frac{\partial \varphi_2^{(0)}}{\partial \mathbf{r}} + \\ + (1-P) \left\{ \frac{\varphi_\alpha^{(0)}}{F_\alpha^{(0)}} \left(\frac{\partial}{\partial t} + v \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right) F_\alpha^{(0)} \right\} + \left[\frac{\partial P}{\partial t} + v \frac{\partial P}{\partial \mathbf{r}} \right] \varphi^{(0)}. \quad (18)$$

Его можно переписать в виде

$$(1-P) \left\{ \frac{1}{F_\alpha^{(0)}} [J_\alpha + R_\alpha]' (F_\alpha^{(0)} \varphi_\alpha^{(0)} \varphi_\alpha^{(1)}) \right\} = \\ = (1-P) \left\{ \frac{1}{F_\alpha^{(0)}} \left(\frac{\partial}{\partial t} + v \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right) \varphi_\alpha^{(0)} F_\alpha^{(0)} \right\}. \quad (19)$$

Здесь $[J_\alpha + R_\alpha]'$ — линеаризованный с функцией $F_\alpha^{(0)} \varphi_\alpha^{(0)}$ полный оператор столкновений. Производные по времени в правой части этого уравнения исключаются с помощью системы (17), после чего в этой части (19) имеем

$$(1-P) \left\{ \frac{1}{E_\alpha^{(0)}} \left[\sum_\beta \frac{\partial (\varphi_\alpha^{(0)} F_\alpha^{(0)})}{\partial n_\beta} r_\beta^{(0)} - \frac{\partial (\varphi_\alpha^{(0)} F_\alpha^{(0)})}{\partial T} \frac{2}{3nk} \times \right. \right. \\ \times \sum_\beta r_\beta^{(0)} \left(\frac{3}{2} kT + H_\beta \right) - \left(\sum_\beta \frac{\partial (\varphi_\alpha^{(0)} F_\alpha^{(0)})}{\partial n_\beta} n_\beta + \frac{\partial (\varphi_\alpha^{(0)} F_\alpha^{(0)})}{\partial T} \frac{2p}{3nk} + \right. \\ \left. \left. + \frac{2}{3} c_\alpha^2 \frac{\partial (\varphi_\alpha^{(0)} F_\alpha^{(0)})}{\partial c_\alpha^2} \right) \operatorname{div} \mathbf{v}_0 + n \left(\sum_\beta \frac{\partial (\varphi_\alpha^{(0)} F_\alpha^{(0)})}{\partial n_\beta} \mathbf{d}_\beta \right) \mathbf{c}_\alpha + \right. \\ \left. + \left(\sum_\beta \frac{\partial (\varphi_\alpha^{(0)} F_\alpha^{(0)})}{\partial n_\beta} \frac{n_\beta m_\beta}{kT} + 2 \frac{\partial (\varphi_\alpha^{(0)} F_\alpha^{(0)})}{\partial c_\alpha^2} \right) \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial \mathbf{r}} \mathbf{c}_\alpha + \right. \\ \left. + \left(\frac{\partial (\varphi_\alpha^{(0)} F_\alpha^{(0)})}{\partial T} - \sum_\beta \frac{n_\beta}{T} \frac{\partial (\varphi_\alpha^{(0)} F_\alpha^{(0)})}{\partial n_\beta} \right) \mathbf{c}_\alpha \frac{\partial T}{\partial \mathbf{r}} - 2 \frac{\partial (\varphi_\alpha^{(0)} F_\alpha^{(0)})}{\partial c_\alpha^2} \mathbf{c}_\alpha \mathbf{c}_\alpha : \frac{\overset{\circ}{d} \mathbf{v}_0}{\partial \mathbf{r}} \right\}, \quad (20)$$

где

$$\mathbf{d}_\beta = \frac{\partial (n_\beta/n)}{\partial \mathbf{r}} + \left(\frac{n_\beta}{n} - \frac{m_\beta n_\beta}{\rho} \right) \frac{\partial \ln p}{\partial \mathbf{r}}.$$

Здесь знаком $\overset{\circ}{a}$ обозначен симметричный бездивергентный тензор

$$\overset{\circ}{a} \equiv \left\{ a_{ij} - \delta_{ij} \frac{1}{3} \sum_{i=j}^3 a_{ii} \right\}. \text{ Замечая, что оператор } P \text{ изменяет только функции}$$

от \mathbf{v}_α , являющиеся коэффициентами при различных градиентах, находим, что решение также должно иметь вид различных неприводимых тензоров

$$\varphi_\alpha^{(1)} = \sum_\beta \chi_{\alpha\beta}^{(1)} r_\beta^{(0)} + \chi_\alpha^{(2)} \sum_\beta r_\beta^{(0)} \left(\frac{3}{2} kT + H_\beta \right) + \chi_\alpha^{(3)} \operatorname{div} \mathbf{v}_0 + \sum_\beta \chi_{\alpha\beta}^{(4)} \mathbf{c}_\alpha \mathbf{d}_\beta + \\ + \chi_\alpha^{(5)} \mathbf{c}_\alpha \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial \mathbf{r}} + \chi_\alpha^{(6)} \mathbf{c}_\alpha \frac{\partial \ln T}{\partial \mathbf{r}} + \chi_\alpha^{(7)} \overset{\circ}{\mathbf{c}}_\alpha \mathbf{c}_\alpha \frac{\overset{\circ}{d} \mathbf{v}_0}{\partial \mathbf{r}}. \quad (21)$$

Вычисленные с этой функцией выражения для потоков имеют вид

$$r_{\alpha} = r_{\alpha}^{(0)} + r_{\alpha}^{(1)} + r_{\alpha}^{(2)} \operatorname{div} \mathbf{v}_0, \quad \mathbf{u}_{\alpha} = \frac{1}{n_{\alpha}} \left[\sum_{\beta} D_{\alpha\beta} \mathbf{d}_{\beta} + M_{\alpha} \frac{\partial P}{\partial \mathbf{r}} + K_{\alpha} \frac{\partial \ln T}{\partial \mathbf{r}} \right], \quad (22)$$

$$\hat{P} = P \operatorname{div} \mathbf{v}_0 + \eta \frac{\partial \mathbf{v}_0}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial \mathbf{v}_0}{\partial \mathbf{r}}, \quad \mathbf{q} = \sum_{\beta} \sigma_{\beta} \mathbf{d}_{\beta} + \pi \frac{\partial P}{\partial \mathbf{r}} + \lambda \frac{\partial \ln T}{\partial \mathbf{r}}.$$

Обычно при решении задач гидродинамики используют уравнения Навье — Стокса для смеси нереагирующих газов, дополненные членами, учитывающими химические реакции. В нашей схеме такие уравнения получились бы при условии $\varphi_{\alpha}^{(0)} = n_{\alpha}$ и выполнении определенных условий симметрии, налагаемых на оператор $[J_{\alpha} + R_{\alpha}]'$. Учет возмущения функции распределения вследствие протекания химической реакции приводит к отличию гидродинамических уравнений (10), (22) от уравнений Навье — Стокса. Это отличие носит двоякий характер. С одной стороны, наличие ненулевой $\varphi_2^{(0)}$ в правой части уравнения (19) приводит к модификации выражений для \mathbf{u}_{α} и \mathbf{q} , так что появляется, например, новый кинетический коэффициент M_{α} , который можно назвать коэффициентом бародиффузии. С другой стороны, оператор столкновений, линеаризованный с помощью функций $F_{\alpha}^{(0)} \varphi_{\alpha}^{(0)}$ не является, вообще говоря, симметричным. Это приводит к тому, что несмотря на линейное соотношение между потоками и соответствующими термодинамическими силами, соотношения взаимности Онзагера могут нарушаться. Поэтому число независимых кинетических коэффициентов резко увеличивается. Кроме того, численная величина общепринятых кинетических коэффициентов для химически реагирующей смеси может отличаться от их значений, вычисленных в пренебрежении химическими реакциями (см. [8] и канд. дис. Е. С. Якуба *).

Отмеченные выше особенности рассматриваемых систем, количественная оценка связанных с ними эффектов и сопоставление с результатами, полученными методом Грэда [8], являются предметом дальнейших исследований.

Институт высоких температур
Академии наук СССР
НИИ механики МГУ

Поступила в редакцию
16 I 1973

ЛИТЕРАТУРА

1. С. В. Валландер, И. А. Егорова, М. А. Рыдалевская. В сб. Аэродинамика разреженных газов, 2. Изд. ЛГУ, 1965, стр. 122.
2. Б. В. Алексеев. В сб. Численные методы в теории разреженных газов. Изд. ВЦ АН СССР, 1969, стр. 140.
3. I. Prigogine, E. Xhroet. Physica, 15, 913, 1949.
4. Е. В. Ступоченко, А. И. Осипов. ТЭХ, 3, 76, 1967; 6, 753, 1970.
5. С. А. Денисюк, С. Н. Лебедев, Ю. Г. Малама, А. И. Осипов. Физика горения и взрыва, 8, № 3, 331, 1972.
6. Г. Людвиг, М. Хейль. В сб. Проблемы механики, вып. 4. Изд. иностр. лит., 1963, стр. 39.
7. Б. В. Алексеев. ТЭХ, 5, 541, 1969.
8. В. М. Жданов, П. П. Скачков. Механика жидкости и газа, № 3, 124, 1972.
9. М. Н. Коган. Динамика разреженного газа. «Наука», 1967.
10. М. А. Красносельский, П. П. Забрёйко, Л. Б. Ругицкий, В. Я. Стаценко. Приближенное решение операторных уравнений. «Наука», 1969.

* Е. С. Якуба. Канд. дис., ОТИХП, Одесса, 1972.