

9. Давтян С. П., Сурков Н. Ф. и др. Кинетика радикальной полимеризации в условиях распространения фронта реакции с учетом гель-эффекта. — ДАН СССР, 1977, т. 232, № 2.
10. Жижин Г. В. Структура волны фронтальной полимеризации. — ДАН СССР, 1982, т. 263, № 6.
11. Жижин Г. В. К расчету структуры волны фронтальной полимеризации. — Кинетика и катализ, 1984, т. 25, № 2.
12. Ваганов Д. А., Жирков П. В. Гидродинамические закономерности фронтальной полимеризации в трубчатом реакторе. — В кн.: Тез. докл. 8-й Всесоюз. конф. по химическим реакторам. Чимкент, 1983, т. 2.
13. Черный Г. Г. Ламинарные движения газа и жидкости в пограничном слое с поверхностью разрыва. — Изв. АН СССР. Отдел техн. наук, 1954, № 12.
14. Зельдович Я. Б., Баренблatt Г. И. и др. Математическая теория горения и взрыва. М.: Наука, 1980.
15. Шлихтинг Г. Теория пограничного слоя. М.: Наука, 1974.
16. Ломов С. А. Введение в общую теорию сингулярных возмущений. М.: Наука, 1981.

Поступила 5/X 1984 г.

УДК 533.915.004.12:546.217

ОПРЕДЕЛЕНИЕ И ВЫЧИСЛЕНИЕ ЭФФЕКТИВНЫХ КОЭФФИЦИЕНТОВ ПЕРЕНОСА ДЛЯ ХИМИЧЕСКИ РАВНОВЕСНЫХ ТЕЧЕНИЙ ЧАСТИЧНО ДИССОЦИИРОВАННЫХ И ИОНИЗОВАННЫХ СМЕСЕЙ ГАЗОВ

C. A. Васильевский, I. A. Соколова, Г. А. Тирский

(Москва)

В [1, 2] получены точные уравнения переноса для многокомпонентной частично ионизованной смеси газов в новой более простой для расчетов форме, а также выведены соответствующие выражения для всех коэффициентов переноса высших приближениях разложения неравновесных функций распределения компонентов по полиномам Сонина и дан подробный численный анализ поведения этих коэффициентов на примере частично ионизованного воздуха. В данной работе рассматривается вывод уравнений переноса для частного, но практически важного случая течения частично диссоциированных и частично ионизованных многокомпонентных смесей газов при условии локального химического равновесия в каждой точке потока (ситуация, распространенная на практике, например, при обтекании тел в режиме сплошной среды при достаточно больших числах Маха и Рейнольдса, в задачах химической технологии и т. д.). Для этого случая впервые вводится полный набор эффективных коэффициентов переноса и проводится их численный анализ с учетом высших приближений, на основании которого даются практические рекомендации по учету высших приближений в эффективных коэффициентах переноса при решении задач тепло- и массообмена в низкотемпературной плазме.

Явлениям переноса в химически равновесных смесях газов посвящена обширная литература. Впервые описание переноса тепла с учетом дополнительного диффузионного переноса «химической» энергии предложено Нернстом [3]. В дальнейшем этот подход для бинарных газовых смесей, в которых протекает одна реакция диссоциации, развит в [4—6] и др. Физическое обоснование этого процесса сводится к тому, что продукты реакции, протекающей в области с повышенной температурой, дифундируют в область с меньшей температурой, где вступают в обратную химическую реакцию. Для многокомпонентных покоящихся ($\nabla p = 0$) газовых смесей с произвольным числом протекающих реакций диссоциации эффективный коэффициент теплопроводности получен в [7, 8], в [9, 10] — для частично ионизованных химически равновесных смесей.

В [3—10] рассматривался вывод только эффективного коэффициента теплопроводности в покоящейся среде, т. е. только молекулярный перенос тепла, но не молекулярный перенос массы в виде диффузии элементов, который с необходимостью появляется при наличии градиента температуры в многокомпонентной смеси с разными диффузионными свойствами компонентов даже при отсутствии эффекта термодиффузии или при наличии градиента давления (см. (2.5)). Диффузия элементов приводит к появлению дополнительного слагаемого в потоке тепла, наличие градиента давления — к появлению дополнительного слагаемого в уравнении энергии. Диффузия элементов в химически равновесных течениях приводит к появлению еще целого ряда перекрестных эффективных коэффициентов переноса, в результате чего диффузионный поток какого-либо элемента зависит от градиентов всех элементов. Впервые на это обращено внимание в [11, 12]. Заметим, что наличие реакций в смеси газов ведет к возмущению

функций распределения компонентов, в этом случае коэффициенты переноса, вообще говоря, должны вычисляться из соответствующих кинетических уравнений с интегралами столкновений, учитывающими «химические» столкновения. Химические реакции нарушают равновесное распределение энергии. Однако, как правило, характерное время реакции велико по сравнению со средним временем свободного пробега частиц, иными словами, скорость реакции мала по сравнению, например, со скоростью установления максвелловского распределения. При этих условиях кинетическое поведение реагирующей смеси в основных чертах количественно близко к поведению нереагирующего газа. Это связано с тем, что процессы упругих столкновений, восстанавливающие максвелловское распределение, намного интенсивней, чем столкновения, приводящие к химическим реакциям. Поэтому имеющиеся в литературе оценки влияния реакций на коэффициенты переноса [13] показывают их малое влияние — несколько процентов при наличии реакций диссоциации и несколько более заметный вклад [14, 15] при наличии реакций ионизации. Как правило, добавок к коэффициенту теплопроводности за счет протекания равновесных химических реакций и «диффузии тепла реакций» намного (до двух порядков) больше его изменения за счет влияния химических реакций на кинетическом уровне. Время протекания равновесных химических реакций по определению много меньше характерного гидродинамического времени, а с другой стороны, много больше времени установления максвелловского распределения. Поэтому за основу в работе берутся уравнения переноса массы компонентов и тепла, выведенные без учета влияния «химических» столкновений на коэффициенты переноса в форме, полученной в [1, 2].

1. Соотношения Стефана — Максвелла и поток тепла для квазинейтральной смеси газов. Будем рассматривать систему уравнений для диффузионных потоков компонентов и уравнение для переноса полного потока тепла, обусловленных градиентами температуры, концентраций, давления и электрическими полями, существующими в плазме, для условий локально-химического равновесия, исходя из общих представлений полных уравнений переноса, полученных методами кинетической теории для многокомпонентных частично ионизованных газовых смесей.

Для многокомпонентных смесей частично ионизованных и диссоциированных газов при отсутствии внешних и наведенных магнитных полей уравнения переноса массы компонентов в форме соотношений Стефана — Максвелла имеют вид [1, 2]

$$(1.1) \quad \mathbf{d}_i = -\Delta_i \mathbf{J}'_i + x_i \sum_{k=1}^N \Delta_{ki} \mathbf{J}'_k, \quad \mathbf{J}'_k = \frac{\mathbf{J}_k}{m_k}, \quad i = 1, \dots, N,$$

где \mathbf{d}_i — векторы диффузионных сил, равные

$$(1.2) \quad \mathbf{d}_i = \nabla x_i + k_{pi} \nabla \ln p + k_{ti}(\xi) \nabla \ln T - \frac{e_i}{p} \left(\rho e_i \mathbf{E} - \sum_{s=1}^N \rho_s e_s \mathbf{E} \right);$$

$c_i, x_i, \mathbf{J}_i, k_{ti}, k_{pi}, e_i, \rho_i, m_i$ — массовая концентрация, молярная концентрация, диффузионный поток, термодиффузионное отношение, бародиффузионное отношение, заряд, плотность, масса i -го компонента соответственно; p, T, ρ — давление, температура, плотность смеси; Δ_{ij} — коэффициенты сопротивления:

$$\Delta_{ij}^{-1} = n \mathcal{D}_{ij}(1) f_{ij}(\xi), \quad \Delta_i = \sum_{k=1}^N x_k \Delta_{ik};$$

$\mathcal{D}_{ij}(1)$ — бинарные коэффициенты диффузии; $f_{ij}(\xi)$ — поправки на высшие приближения; \mathbf{E} — напряженность электрического поля.

В выражении для вектора диффузионных сил (1.2) векторы внешних сил $\mathbf{F}_i (\mathbf{F}_i = e_i \mathbf{E})$ определены из условия отсутствия магнитного поля. При условии квазинейтральности (малые отклонения от локальной электронейтральности в ионизованном газе порождают весьма интенсивные электрические поля, которые вынуждают плазму к быстрому возврату за время $\tau = m_E / 4\pi n_E e^2$ в состояние нейтральности) имеем

$$(1.3) \quad \sum_{k=1}^N x_k \frac{e_k}{\varepsilon_E} = 0.$$

Условие (1.3) совместно с условием сохранения заряда в реакциях (1.6)

$e_i = v_{iE}e_E$ (v_{iE} — стехиометрические коэффициенты реакции ионизации, индекс E относится к электрону) позволяет исключить поле \mathbf{E} из соотношений Стефана — Максвелла (1.1), (1.2). Для этого выражения для векторов диффузионных сил (1.2) подставляются в уравнения (1.1) и каждое уравнение ($i = 1, \dots, N$) умножается на e_i/e_E . Затем производится суммирование от 1 до N и используется условие (1.3), представленное в дифференциальном виде. Такая процедура позволяет получить явное выражение для вектора напряженности поля \mathbf{E} , которое затем подставляется в выражение (1.2) и тем самым исключается из соотношений Стефана — Максвелла. В результате [16]

$$(1.4) \quad \mathbf{d}_i = -\Delta_i \mathbf{J}'_i + x_i \sum_{k=1}^N \delta_{ik}^{(0)} \mathbf{J}'_k,$$

где

$$(1.5) \quad \mathbf{d}_i = \nabla x_i + k_{pi}^{(0)} \nabla \ln p + k_{ti}^{(0)} \nabla \ln T.$$

$$\text{Здесь } k_{ti}^{(0)} = k_{ti} - x_i \zeta_i \sum_{s=1}^N \zeta_s k_{ts}; \quad \delta_{ij}^{(0)} = \Delta_{ij} + \zeta_i \sum_{k=1}^N x_k (\zeta_j - \zeta_k) \Delta_{kj}; \quad k_{pi}^{(0)} = \\ = k_{pi} - x_i \zeta_i \sum_{s=1}^N \zeta_s k_{ps}; \quad \zeta_i = e_i \left(\sum_{h=1}^N x_h e_h^2 \right)^{-1/2}.$$

Причем удовлетворяются следующие соотношения:

$$\sum_{i=1}^N k_{ti}^{(0)} = 0, \quad \sum_{i=1}^N k_{pi}^{(0)} = 0, \quad \sum_{i=1}^N x_i \delta_{ij}^{(0)} = \Delta_j, \\ \sum_{i=1}^N e_i k_{ti}^{(0)} = 0, \quad \sum_{i=1}^N e_i k_{pi}^{(0)} = 0, \quad \sum_{i=1}^N x_i e_i \delta_{ij}^{(0)} = e_j \Delta_j.$$

По форме уравнения (1.4), (1.5) совпадают с соответствующими уравнениями для смесей нейтральных компонентов, но в полученных выражениях для коэффициентов содержатся дополнительные члены, зависящие от зарядов частиц e_i . В случае смесей нейтральных частиц, для которых все $e_i \equiv 0$, добавочные члены в выражениях для коэффициентов в соотношениях (1.4), (1.5) обращаются в нуль, и в этом случае соотношения Стефана — Максвелла (1.4), (1.5) переходят в обычные соотношения для нейтральных смесей, т. е. совпадают с системой (1.1), (1.2), если положить в ней $\mathbf{E} \equiv 0$.

Для дальнейшего рассмотрения перейдем в соотношениях (1.4), (1.5) от молярных концентраций x_i к массовым концентрациям c_i , воспользовавшись соотношениями ($c_i = (m_i/m)x_i$)

$$\nabla c_i = \frac{m_i}{m^2} \left[\sum_{h=1}^N m_h (x_h \nabla x_i - x_i \nabla x_h) \right].$$

Кроме того, для удобства решения задач гидродинамики выделим уравнения переноса массы компонентов для элементов B_j ($j = 1, \dots, L$), записав их отдельно от уравнений переноса продуктов реакций A_i ($i = L + 1, \dots, N$), связанных между собой системой линейно-независимых реакций:

$$(1.6) \quad A_i = \sum_{j=1}^L v_{ij} B_j, \quad i = L + 1, \dots, N,$$

где L — число элементов; v_{ij} — стехиометрические коэффициенты реакций; N — число компонентов в смеси.

Так же как в [1], определим c_j^* (концентрации элементов) и \mathbf{J}_j^* (диффузионные потоки элементов) в соответствии с записью реакций в виде (1.6) следующим образом:

$$(1.7) \quad c_j^* = c_j + \sum_{k=L+1}^N v_{kj} \frac{m_j}{m_k} c_k, \quad \mathbf{J}_j^* = \mathbf{J}_j + \sum_{k=L+1}^N v_{kj} \frac{m_j}{m_k} \mathbf{J}_k.$$

В результате несложных преобразований соотношений (1.4), (1.5) получим для элементов $j = 1, \dots, N$

$$(1.8) \quad \mathbf{d}_j^* = -\frac{\Delta_j}{m} \mathbf{J}_j^* + \frac{m_j}{m} \sum_{l=1}^L \Delta_{jl}^* \mathbf{J}_l^{*' *} + \frac{m_j}{m} \sum_{h=L+1}^N \delta_{jh}^* \mathbf{J}_h',$$

где

$$\mathbf{d}_j^* = \nabla c_j^* + K_{pj}^* \nabla \ln p + K_{Tj}^* \nabla \ln T;$$

для продуктов реакций $i = L+1, \dots, N$

$$(1.9) \quad \mathbf{d}_i = -\frac{\Delta_i}{m} \mathbf{J}_i + c_i \sum_{l=1}^L \Delta_{il}^{(0)} \mathbf{J}_l^{*' *} + c_i \sum_{h=L+1}^N \Delta_{ih}^{(1)} \mathbf{J}_h',$$

где

$$\mathbf{d}_i = \nabla c_i + K_{pi}^{(0)} \nabla \ln p + K_{Ti}^{(0)} \nabla \ln T.$$

Здесь

$$\begin{aligned} \Delta_{jl}^* &= x_j \Delta_{jl} + \sum_{k=L+1}^N x_k v_{kj} \Delta_{kl} + x_j^* \sum_{r=1}^N x_r \left(\frac{m_l}{m} - \frac{m_r}{m} \right) \Delta_{rl} + \\ &+ \left(x_i \zeta_i^* + \sum_{k=L+1}^N x_k v_{kj} \zeta_k^* \right) \sum_{r=1}^N x_r (\zeta_l - \zeta_r) \Delta_{rl}, \\ \delta_{jh}^* &= v_{kj} (\Delta_j - \Delta_h) + \Delta_{jh}^* - \sum_{l=1}^L v_{hl} \Delta_{jl}^*, \\ \Delta_{ij}^{(0)} &= \Delta_{ij} - \sum_{s=1}^N x_s \left(\frac{m_s}{m} - \frac{m_j}{m} \right) \Delta_{si} - \zeta_j^* \sum_{s=1}^N x_s (\zeta_s - \zeta_j) \Delta_{sj}, \\ \Delta_{jk}^{(1)} &= \Delta_{jh}^{(0)} - \sum_{l=1}^L v_{hl} \Delta_{jl}^{(0)}, \quad \zeta_i^* = \zeta_i - \sum_{k=1}^N c_k \zeta_k, \quad x_j^* = x_j + \sum_{l=L+1}^N v_{lj} x_l, \\ K_{Tj}^{(0)} &= K_{Tj}^{(0)} + \sum_{k=L+1}^N v_{kj} (m_j/m_k) K_{Tk}^{(0)}, \\ K_{Ti}^{(0)} &= \frac{m_i}{m} k_{ti} - c_i \sum_{s=1}^N \frac{m_s}{m} k_{ts} - c_i \zeta_i^* \sum_{s=1}^N \zeta_s k_{ts}, \\ K_{pj}^* &= K_{pj}^{(0)} + \sum_{k=L+1}^N v_{kj} (m_j/m_k) K_{pk}^{(0)}, \\ K_{pi}^{(0)} &= \frac{m_i}{m} k_{pi} - c_i \sum_{s=1}^N \frac{m_s}{m} k_{ps} - c_i \zeta_i^* \sum_{s=1}^N \zeta_s k_{ps}. \end{aligned}$$

Причем в силу условий $\sum_{j=1}^L \mathbf{d}_j^* = 0$ и $c_E^* = \frac{m_E}{m} \sum_{k=1}^N x_k \frac{e_k}{e_E} = 0$ для смеси электронейтральных компонентов независимых соотношений (1.8), (1.9) будет $N=1$, а для квазинейтральной смеси, содержащей заряженные частицы, — $N=2$. В заключение системы уравнений (1.8), (1.9) представим в более завершенном виде, вводя принятые в задачах гидродинамики безразмерные числа Шмидта. Обозначив $S_i = (\mu(\xi)/m)\Delta_i$, получим для элементов $j = 1, \dots, L$

$$(1.10) \quad \mathbf{d}_j^* = -\frac{S_j}{\mu(\xi)} \mathbf{J}_j^* + \frac{m_j S_j}{\mu(\xi)} \left(\sum_{l=1}^L \alpha_{jl}^* \mathbf{J}_l^{*' *} + \sum_{k=L+1}^N \beta_{jk}^* \mathbf{J}_k' \right);$$

для продуктов реакций $i = L + 1, \dots, N$

$$\mathbf{d}_i = -\frac{S_i}{\mu(\xi)} \mathbf{J}_i + x_i \frac{m_i S_i}{\mu(\xi)} \left(\sum_{l=1}^L \alpha_{il} \mathbf{J}_l^{*'} + \sum_{k=L+1}^N \beta_{ik} \mathbf{J}_k' \right),$$

где $\alpha_{jl}^* = \frac{\Delta_{jl}^*}{\Delta_j}$; $\alpha_{il} = \frac{\Delta_{il}^{(0)}}{\Delta_i}$; $\beta_{jl}^* = \frac{\delta_{jl}^*}{\Delta_j}$; $\beta_{ik} = \frac{\Delta_{ik}^{(1)}}{\Delta_i}$.

Уравнение для полного потока тепла [1]

$$\mathbf{J}_q = -\lambda(\xi) \nabla T + kT \sum_{k=1}^N \alpha_{tk}(\xi) \mathbf{J}_k' + \sum_{k=1}^N h_k \mathbf{J}_k$$

($\lambda(\xi)$ — «истинный» коэффициент теплопроводности, k — постоянная Больцмана, $\alpha_{tk}(\xi)$ — термодиффузионный фактор, h_k — удельная энтальпия k -го компонента) также преобразуем, вводя в него диффузионные потоки элементов \mathbf{J}_j^* вместо диффузионных потоков компонентов \mathbf{J}_j , используя соотношения между ними (1.7). С учетом соотношений для энтальпий продуктов реакций, вытекающих из закона сохранения энергии, в реакциях (1.6)

$$h_i = \sum_{l=1}^L v_{il} \frac{m_l}{m_i} h_l - q_i(T), \quad i = L + 1, \dots, N,$$

получим

$$(1.11) \quad \mathbf{J}_q = -\lambda(\xi) \nabla T + \sum_{j=1}^L h_j^T \mathbf{J}_j^* - \sum_{k=L+1}^N q_k^T \mathbf{J}_k,$$

где

$$h_j^T = h_j + kT \alpha'_{tj}; \quad \beta_{ti} = \alpha_{ti} - \sum_{j=1}^L v_{ij} \alpha_{tj}; \quad q_i^T = q_i - kT \beta'_{ti};$$

$$\beta'_{ti} = \frac{\beta_{ti}}{m_i}, \quad \alpha_{ti} = \frac{k_{ti}(\xi)}{x_i}; \quad \alpha'_{ti} = \frac{\alpha_{ti}}{m_i}.$$

Здесь $q_i(T)$ — удельные теплоты реакций (1.6); $h_i(T)$ — удельные энтальпии. Переходя в (1.11) к градиенту полной энтальпии ($H = h + v^2/2$)

$$\nabla H = \nabla \left(\sum_{k=1}^N c_k h_k + \frac{v^2}{2} \right) = c_p \nabla T + \sum_{j=1}^L h_j \nabla c_j^* - \sum_{k=L+1}^N q_k \nabla c_k + \nabla \left(\frac{v^2}{2} \right),$$

имеем

$$(1.12) \quad \mathbf{J}_q = -\frac{\mu}{\sigma} \left[\nabla H - \nabla \left(\frac{v^2}{2} \right) - \sum_{j=1}^L \left(h_j \nabla c_j^* + \frac{\sigma}{\mu} h_j^T \mathbf{J}_j^* \right) + \sum_{k=L+1}^N \left(q_k \nabla c_k + \frac{\sigma}{\mu} q_k^T \mathbf{J}_k \right) \right],$$

где $\sigma = (\mu(\xi) c_p)/\lambda(\xi)$ — число Прандтля; c_p — коэффициент удельной теплоемкости смеси при постоянном давлении. Уравнения переноса (1.8), (1.9), (1.12) справедливы при произвольном протекании химических реакций.

2. Уравнения переноса массы и поток тепла для химически равновесных течений. Рассмотрим уравнения переноса массы компонентов (1.8), (1.9) и потока тепла (1.12) при условии химического равновесия. В этом случае в полной системе уравнений Навье — Стокса [1] источниковые члены массы \dot{W}_i вырождаются в конечные соотношения, так называемые условия химического равновесия, которыми заменяются уравнения сохранения массы компонентов — продуктов реакций. Из всех дифференциальных

ных уравнений сохранения массы компонентов остаются уравнения только для сохранения массы химических элементов c_j^* ($j = 1, \dots, L$), которые замыкаются (1.8). При заданном элементном составе c_j^* концентрации компонентов x_i ($i = 1, \dots, N$) определяются из системы алгебраических уравнений [17]

$$(2.1) \quad \begin{aligned} \frac{\prod_{j=1}^L x_j^{v_{ij}}}{x_i} &= \frac{K_{pi}(T)}{p^{v_i}}, \quad i = L + 1, \dots, N; \\ x_j \frac{m_j}{m} + \sum_{i=L+1}^N v_{ij} \frac{m_j}{m} x_i &= c_j^*, \quad j = 1, \dots, L, \quad \sum_{k=1}^N x_k = 1, \end{aligned}$$

где $K_{pi}(T)$ — константа равновесия; $v_i = \sum_{j=1}^L v_{ij} - 1$. Первая группа уравнений (2.1) представляет собой условия химического равновесия Гульдберга — Вааге для химических реакций и уравнения Сахá для реакций ионизации, вторая группа — уравнения материального баланса. Для ионизованных смесей газов система (2.1) дополняется условием квазинейтральности $c_E^* = 0$.

Система (2.1) устанавливает неявную зависимость концентраций продуктов реакций x_i ($i = L + 1, \dots, N$) через концентрации химических элементов c_j^* ($j = 1, \dots, L$), p и T , что позволяет в уравнениях (1.8) и (1.12) исключить градиенты концентраций продуктов реакций ∇c_i ($i = L + 1, \dots, N$) и потоки продуктов реакций \mathbf{J}_i ($i = L + 1, \dots, N$), выразив их через ∇c_j^* и \mathbf{J}_j^* элементов соответственно, а также через ∇p и ∇T .

Для этого перейдем в системе (2.1) к массовым концентрациям c_i , возьмем операцию ∇ от логарифма каждого уравнения химического равновесия, выразим с помощью (1.7) ∇c_j ($j = 1, \dots, L$) через ∇c_i^* ($j = 1, \dots, L$) и ∇c_i ($i = L + 1, \dots, N$) и воспользуемся уравнениями изохор Вант — Гоффа [3]:

$$(2.2) \quad \frac{d \ln K_{pi}(T)}{dT} = \frac{m_i q_i}{k T^2}, \quad i = L + 1, \dots, N.$$

Тогда для определения $\nabla c_i' = \nabla \left(\frac{c_i}{m_i} \right)$ ($i = L + 1, \dots, N$) имеем систему уравнений

$$(2.3) \quad \sum_{k=L+1}^N a_{ik} \nabla c_k' = - \frac{m_i q_i}{m_i k T} \nabla \ln T + \frac{v_i}{m} \nabla \ln p + \sum_{j=1}^L v_{ij}^* \nabla c_j^{**},$$

$$\text{где } a_{ik} = a_{ki} = \sum_{j=1}^L \frac{v_{ij} v_{kj}}{x_j} - v_i v_j + \frac{\delta_{ik}}{x_i}; \quad v_{ij}^* = \frac{v_{ij}}{x_j} - v_i.$$

Для определения диффузионных потоков продуктов реакций \mathbf{J}_i ($i = L + 1, \dots, N$) воспользуемся (1.1), (2.1), (2.2). Исключая из них с помощью (1.7) диффузионные потоки компонентов-элементов, выразив \mathbf{J}_j через \mathbf{J}_j^* , получим систему уравнений [16]

$$(2.4) \quad \begin{aligned} \sum_{k=L+1}^N b_{ik} \mathbf{J}'_k &= \frac{m_i q_i T}{k T} \nabla \ln T + \sum_{j=1}^L d_{ij} \mathbf{J}_j^{**}, \\ \text{где } b_{ik} = b_{ki} &= \sum_{j=1}^L \frac{v_{ij} v_{kj}}{x_j} \Delta_j - \sum_{j=1}^L \sum_{l=1}^L v_{ij} v_{kl} \Delta_{jl} + \\ &+ \sum_{j=1}^L (v_{ij} \Delta_{jk} + v_{kj} \Delta_{ji}) - \Delta_{ik} + \frac{\delta_{ik}}{x_i} \Delta_i; \end{aligned}$$

$$d_{ij} = \Delta_{ij} + v_{ij}\Delta_j/x_j - \sum_{l=1}^L v_{il}\Delta_{lj}, \quad j = 1, \dots, L; \quad k, i = L+1, \dots, N.$$

Следует отметить, что система (2.4) получается в таком же виде и без предположения о квазинейтральности смеси, тем не менее в силу уравнений сохранения массы и заряда в реакциях электрическое поле \mathbf{E} явно в (2.4) не вошло [16]. Кроме того, сохранение в (1.1) члена, учитывающего бародиффузию, не приводит к появлению члена с $\nabla \ln p$ в (2.4) справа.

При химически равновесных течениях для замыкания системы уравнений Навье — Стокса необходимы уравнения переноса массы только для элементов. Поэтому исключим из (1.10) суммы $\sum_{k=L+1}^N \beta_{jk}^* \mathbf{J}_k$, используя для этого решение системы (2.4). В результате найдем

$$(2.5) \quad \mathbf{d}_j = -\frac{S_j}{\mu} \mathbf{J}_j^* + \frac{m_j S_j}{\mu} \sum_{l=1}^L \alpha_{jl}^{(e)} \mathbf{J}_l^{**},$$

$$\text{где } \mathbf{d}_j = \nabla c_j^* + \left(K_{Tj}^* - \frac{m_j}{m} \delta_j^{(e)} \right) \nabla \ln T + K_{pj}^* \nabla \ln p.$$

Здесь

$$\alpha_{jl}^{(e)} = \alpha_{jl}^* + \alpha_{jl}^{**};$$

$$(2.6) \quad \alpha_{jl}^{**} = -\frac{1}{\Delta_j \det \| b_{ik} \|} \begin{vmatrix} 0 & d_{L+1,l} & \dots & d_{N,l} \\ \delta_{j,L+1}^* & b_{L+1,L+1} & \dots & b_{L+1,N} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \delta_{j,N}^* & b_{N,L+1} & \dots & b_{N,N} \end{vmatrix};$$

$$(2.7) \quad \delta_j^{(e)} = -\frac{1}{kT \det \| b_{ik} \|} \begin{vmatrix} 0 & Q_{L+1}^T & \dots & Q_N^T \\ \delta_{j,L+1}^* & b_{L+1,L+1} & \dots & b_{L+1,N} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \delta_{j,N}^* & b_{N,L+1} & \dots & b_{N,N} \end{vmatrix}.$$

Для химически равновесных течений (1.12) преобразуется. Суммы $\sum_{k=L+1}^N q_k \nabla c_k$ и $\sum_{k=L+1}^N q_k^T \mathbf{J}_k$, фигурирующие в (1.12), с помощью решений уравнений (2.3) и (2.4) можно записать в виде

$$(2.8) \quad \sum_{k=L+1}^N q_k \nabla c_k = -c_{pr} \nabla T + a(v, Q) \frac{\nabla \rho}{\rho} + \sum_{j=1}^L a(v^*, Q) \nabla c_j^*;$$

$$(2.9) \quad \sum_{k=L+1}^N q_k^T \mathbf{J}_k = \lambda_r \nabla T + \sum_{j=1}^L b_j(d, Q^T) \mathbf{J}_j^*,$$

где

$$(2.10) \quad c_{pr} = -\frac{1}{mkT^2 \det \| a_{ik} \|} \begin{vmatrix} 0 & Q_{L+1} & \dots & Q_N \\ Q_{L+1} & a_{L+1,L+1} & \dots & a_{L+1,N} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ Q_N & a_{N,L+1} & \dots & a_{N,N} \end{vmatrix};$$

$$(2.11) \quad \lambda_r = -\frac{1}{kT^2 \det \| b_{ik} \|} \begin{vmatrix} 0 & Q_{L+1}^T & \dots & Q_N^T \\ Q_{L+1}^T & b_{L+1,L+1} & \dots & b_{L+1,N} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ Q_N^T & b_{N,L+1} & \dots & b_{N,N} \end{vmatrix};$$

$$(2.12) \quad a_j(v^*, Q) = -\frac{1}{m_j \det \| a_{ik} \|} \begin{vmatrix} 0 & Q_{L+1} & \dots & Q_N \\ v_{L+1,j}^* & a_{L+1,L+1} & \dots & a_{L+1,N} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ v_{N,j}^* & a_{N,L+1} & \dots & a_{N,N} \end{vmatrix};$$

$$(2.13) \quad b_j(d, Q^T) = -\frac{1}{m_j \det \| b_{ik} \|} \begin{vmatrix} 0 & Q_{L+1}^T & \cdots & Q_N^T \\ d_{L+1,j} & b_{L+1,L+1} & \cdots & b_{L+1,N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ d_{N,j} & b_{N,L+1} & \cdots & b_{N,N} \end{vmatrix};$$

$$a(v, Q) = -\frac{1}{kT \det \| a_{ik} \|} \begin{vmatrix} 0 & Q_{L+1} & \cdots & Q_N \\ v_{L+1} & a_{L+1,L+1} & \cdots & a_{L+1,N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ v_N & a_{N,L+1} & \cdots & a_{N,N} \end{vmatrix},$$

$$Q_i = m_i q_i, \quad Q_i^T = m_i q_i^T.$$

Тогда выражение для (1.12) при использовании (2.8), (2.9) принимает компактный вид

$$(2.14) \quad \mathbf{J}_q = -\lambda_{\text{eff}} \nabla T - \sum_{j=1}^L b_j^* \mathbf{J}_j^*,$$

где

$$\lambda_{\text{eff}} = \lambda + \lambda_r; \quad b_j^* = b_j(d_j, Q^T) - h_j^T;$$

λ_{eff} — эффективный коэффициент теплопроводности, равный сумме молекулярного коэффициента теплопроводности, характеризующего перенос тепла за счет поступательных степеней свободы, и λ_r — коэффициента переноса тепла за счет диффузии реагирующих компонентов. Выражение (1.12), записанное через полную энталпию, преобразуется к виду

$$(2.15) \quad \mathbf{J}_q = -\frac{\mu}{\sigma_{\text{eff}}} \left[\nabla \left(H - \frac{v^2}{2} \right) + a(v, Q) \frac{\nabla p}{\rho} + \sum_{j=1}^L \left(a_j^* \nabla c_j^* + \frac{\sigma_{\text{eff}}}{\mu} b_j^* \mathbf{J}_j^* \right) \right],$$

где

$$(2.16) \quad \sigma_{\text{eff}} = \frac{\mu c_{p,\text{eff}}}{\lambda_{\text{eff}}} = \frac{\mu (c_{pr} + c_p)}{\lambda + \lambda_r}; \quad a_j^* = a_j(v^*, Q) - h_j$$

(σ_{eff} — эффективное число Прандтля).

Таким образом, при условии химического равновесия в уравнении переноса для полного потока тепла (2.14), помимо дополнительного, так называемого «химического» вклада в коэффициент теплопроводности λ_{eff} , имеется также дополнительный член, содержащий диффузионные потоки элементов $\sum_{j=1}^L b_j^* \mathbf{J}_j^*$, а в (2.15) — дополнительный вклад за счет химических реакций, выражающийся в появлении дополнительных слагаемых с ∇p , ∇c_j^* и \mathbf{J}_j^* , которые ранее в литературе не рассматривались.

Коэффициенты переноса в уравнениях переноса массы (2.5) и в уравнении для полного потока тепла (2.15) за счет химических реакций зависят только от локального состава плазмы, p , T и концентраций элементов $c_j^* (j = 1, \dots, L)$, которые должны находиться из решения конкретной задачи, а также от интегралов столкновений частиц $Q_{ij}^{l,s}(T)$.

3. Численный расчет эффективных коэффициентов переноса ионизованного воздуха при химически равновесных течениях. На основе полученных в высших приближениях коэффициентов переноса частично ионизированной смеси кислорода и азота [1] рассчитаны все эффективные коэффициенты переноса, фигурирующие в (2.5) и (2.15), и исследовано влияние на них переносных свойств смеси и тепловых эффектов равновесных химических реакций. Приведем некоторые наиболее интересные результаты.

На рис. 1 представлены значения $\delta_j^{(e)} m_j / m$ (уравнения (2.5)) для О (кислород) при значениях давления $p = 1,013 \cdot 10^5$; $1,013 \cdot 10^7$ Па (линии 1, 2). В области диссоциации воздуха величина $\delta_j^{(e)} m_j / m$ достигает 0,2—0,3. Это означает, что даже в случае пренебрежения термодиффузией ($k_{Ti} = 0$) и бародиффузией ($k_{pi} = 0$) диффузионные потоки элементов \mathbf{J}_j^* ($j = 1, \dots, L$) за счет различия диффузионных свойств компонентов

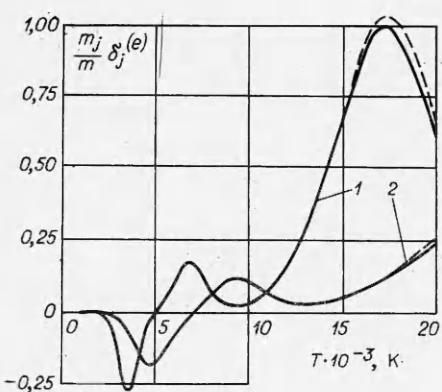


Рис. 1

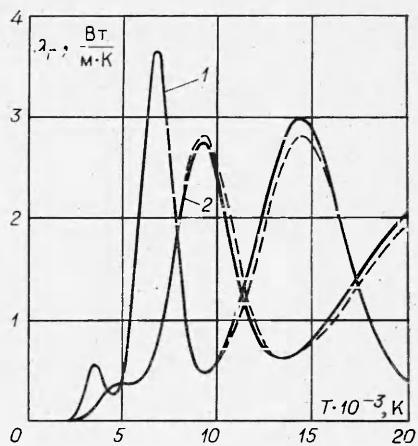


Рис. 2

$(\delta_j^{(e)} = 0$ при одинаковых диффузионных свойствах компонентов) при наличии градиента температуры отличны от нуля. Таким образом, в потоке при наличии химических реакций диссоциации возникает заметное разделение элементов (результат, полученный ранее при численном расчете конкретных течений диссоциирующих газов [18]). В области ионизации $\delta_j^{(e)} m_j / m$ еще более возрастает и эффект разделения элементов становится более существенным. При одинаковых диффузионных свойствах компонентов смеси $\Delta_{ik} = \Delta$ ($i, k = 1, \dots, N$) коэффициент $\delta_j^{(e)}$ обращается тождественно в нуль, и разделения элементов не происходит при $k_{ti} = k_{pi} = 0$ ($i = 1, \dots, N$).

Коэффициенты λ_r (2.11) и c_{pr} (2.10), появляющиеся в уравнении для полного потока тепла (2.14) (или (2.15)) при равновесно протекающих химических реакциях, входят в уравнение в виде комбинации σ_{eff} (2.16). При интенсивном протекании реакций (диссоциация N_2 , O_2 , NO или ионизация N, O) значения λ_r и c_{pr} могут в несколько раз превышать соответствующие значения λ и c_p для химически замороженных течений. На рис. 2 приводятся значения λ_r ($\text{Вт}/(\text{м}\cdot\text{К})$) для $p = 1,013 \cdot 10^5$; $1,013 \cdot 10^7$ Па (линии 1, 2). Однако изменение эффективного числа Прандтля, показанного на рис. 3, оказывается более слабым по сравнению с изменением по отдельности λ_r и c_{pr} : в области реакций диссоциации изменение $\sigma_{eff} \sim 10\%$, а в области реакций ионизации $\sim 40\%$ (в данном расчете двукратной ионизацией пренебрегалось, и в области высоких температур при малых давлениях число Прандтля σ_{eff} оказывалось малым). На рис. 3 линии 1—3 соответствуют $p = 1,013 \cdot 10^5$; $1,013 \cdot 10^6$; $1,013 \cdot 10^7$ Па.

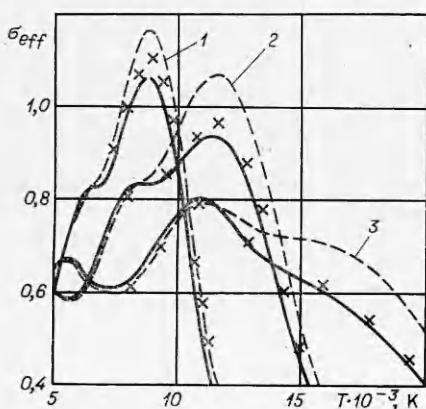


Рис. 3

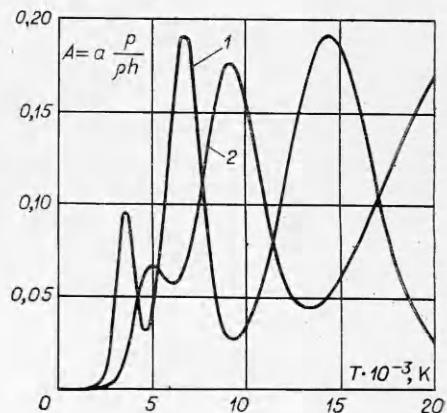


Рис. 4

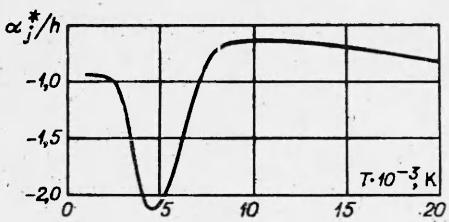


Рис. 5

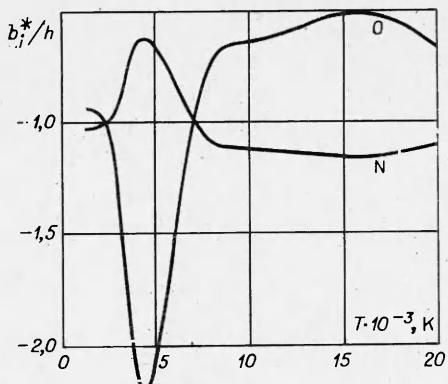


Рис. 6

Для анализа влияния на поток тепла (2.15) членов с градиентами ∇H , ∇p , ∇c_j^* и \mathbf{J}_j^* интересно проследить изменения коэффициентов, стоящих в уравнении перед этими членами. На рис. 4—6 приводятся значения коэффициентов $A = a(v, Q) (p/\rho h)$ (2.13), a_j^*/h (2.16) и b_j^*/h (2.14), обезразмеренных в соответствии с уравнением (2.15). Результаты численных расчетов показывают характер изменения A при диссоциации и ионизации, однако сама величина этого коэффициента меняется в пределах от 0 до 0,20 во всей области T и p . Диапазон изменения a_j^*/h и b_j^*/h приблизительно одинаков: от 0 до 2,5.

О влиянии на потоки термо- и бародиффузии можно судить по значениям K_{tj}^* и K_{pj}^* . Мы не приводим подробные результаты численных расчетов этих коэффициентов, укажем только, что K_{tj}^* не превышает значений $\sim 0,01$ при диссоциации и значений $\sim 0,025$ при ионизации, а K_{pj}^* не превышает значений $\sim 0,08$ при диссоциации и значения 0,06 при ионизации [19]. На рис. 4 $p = 1,013 \cdot 10^5$; $1,013 \cdot 10^7$ Па (линии 1, 2), на рис. 5 $\mu = 1,013 \cdot 10^5$ Па, на рис. 6 $p = 1,013 \cdot 10^5$ Па.

4. Влияние учета высших приближений на эффективные коэффициенты переноса. Систематическое исследование сходимости высших приближений при расчете эффективных коэффициентов в уравнениях переноса ранее не проводилось. Выражение для λ_r [8, 9], широко используемое при расчете эффективного коэффициента теплопроводности ионизованного газа, получено без учета высших приближений. До настоящего времени расчеты коэффициента λ_r в высших приближениях не проводились. То же самое можно сказать о $\delta_j^{(e)} m_j/m$, которым при расчете химически равновесных течений ранее пренебрегалось, так что влияние высших приближений на эти коэффициенты неизвестно.

Как показано в [2], для вычисления коэффициентов переноса с заданной точностью следует, вообще говоря, для разных коэффициентов использовать разное число приближений ξ . Эффективные коэффициенты переноса — функции нескольких или всех коэффициентов переноса, поэтому исследование их сходимости по ξ должно проводиться комплексно с учетом различного порядка сходимости молекулярных коэффициентов. Численные расчеты эффективных коэффициентов переноса с учетом различных приближений в исходных коэффициентах переноса показали хорошую сходимость всех эффективных коэффициентов для диссоциированного и ионизованного воздуха.

Влияние учета высших приближений при расчете $\delta_j^{(e)}$ (2.7) показано на рис. 1: сплошные линии — точные значения $\delta_j^{(e)} m_j/m$, т. е. в этом случае при вычислении $k_{ti}(\xi)$ и $\varphi_{ij}(\xi)$, используемых при расчете $\delta_j^{(e)}$, бралось четвертое приближение $\xi = 4$; штриховые линии — значения $\delta_j^{(e)} m_j/m$, рассчитанные без учета термодиффузии, т. е. при $k_{ti} = 0$, и без учета поправочных множителей к коэффициентам сопротивления Δ_{ij} [2] (при $\varphi_{ij} = 0$). Видно, что пренебрежение термодиффузионными отношениями

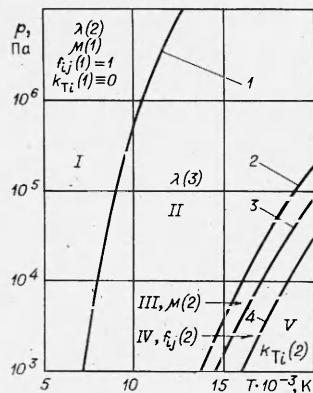


Рис. 7

k_{ti} и поправочными множителями φ_{ij} при расчете $\delta_j^{(e)}$ приводят к заметной ошибке ($\sim 2-5\%$) только в области частичной ионизации.

На рис. 2 показаны результаты расчета λ_r (2.11) при использовании различных приближений ξ при вычислении k_{ti} , φ_{ij} , необходимых для расчета λ_r . Оказалось, что вклад термодиффузионных отношений k_{ti} в λ_r во всем рассматриваемом диапазоне не превышает $\sim 5\%$, а поправочные множители φ_{ij} вносят в λ_r вклад $\sim 2\%$. Таким образом, при расчете $\delta_j^{(e)}$ и λ_r проводить вычисления значений $k_{ti}(\xi)$ и $\varphi_{ij}(\xi)$ в высших приближениях не требуется, а в пределах точности $\sim 5\%$ k_{ti} и φ_{ij} можно пренебречь вообще.

Число Прандтля σ_{eff} (2.16) представлено на рис. 3. Поскольку высшие приближения

при расчете λ_r несущественны, число приближений, необходимое для расчета σ_{eff} , определяется точностью расчета отношения $\mu(\xi)/\lambda(\xi)$. Расчет коэффициента $\lambda(\xi)$ с точностью 2% достаточно проводить в третьем приближении ξ , а расчет $\mu(\xi)$ — во втором [2]. На рис. 3 сплошной линией показаны точные значения σ_{eff} , т. е. расчеты всех исходных коэффициентов переноса выполнены в наивысших приближениях ξ , штриховой — значения σ_{eff} , полученные при расчете $\lambda(\xi)$ во втором приближении ($\xi = 2$), а коэффициента $\mu(\xi)$ — в первом. Крестиками на рис. 3 показаны значения σ_{eff} , рассчитанные без учета поправочных коэффициентов к Δ_{ij} и без учета термодиффузионных отношений ($\varphi_{ij} = 0$, $k_{ti} = 0$). Таким образом, видно, что роль k_{ti} и φ_{ij} при расчете σ_{eff} мала, влияние их на $\sigma_{eff} \leqslant 5\%$. Однако коэффициенты вязкости и теплопроводности необходимо рассчитывать во втором и третьем приближениях ξ соответственно. Неправильный выбор числа приближений ξ при расчете σ_{eff} может приводить к ошибке $\geqslant 60\%$ в области сильной ионизации.

Влияние точности расчета $k_{ti}(\xi)$ и $\varphi_{ij}(\xi)$ на α_{jl}^{**} (2.6) в уравнении переноса элементов (2.5) и на a_j^* (2.16) и b_j^* (2.14) в уравнении для полного потока тепла (2.15) оказывается таким же, как и при расчете $\delta_j^{(e)}$. Влияние высших приближений на расчет K_{ij}^* в (2.5) целиком определяется точностью расчета $k_{ti}(\xi)$, однако сами коэффициенты K_{ij}^* достаточно малы, и учет высших приближений при расчете $k_{ti}(\xi)$ не является существенным. Коэффициенты K_{ij}^* в (2.5) и $a(v, Q)$ (2.13) в (2.15) являются чисто термодинамической природы и от высших приближений не зависят. Не зависит от высших приближений также коэффициент $S_j/\mu = \Delta_j/m$: в силу условий [1] $\sum_{j=1}^N [x_i x_j / \mathcal{D}_{ij}(1)] \varphi_{ij}(\xi) = 0$ коэффициент Δ_j от поправочных множителей $\varphi_{ij}(\xi)$ не зависит.

Таким образом, для частично ионизованного воздуха при расчете диффузионных потоков элементов J_j^* и полного потока тепла J_q термодиффузионные отношения $k_{ti}(\xi)$ и поправочные множители $\varphi_{ij}(\xi)$ следует рассчитывать во втором приближении ξ (первое ненулевое приближение). С точностью $\sim 5\%$ в области частичной ионизации $k_{ti}(\xi)$ можно пренебречь при расчете всех рассматриваемых коэффициентов, а $\varphi_{ij}(\xi)$ можно пренебречь при расчете всех эффективных коэффициентов в уравнении для полного потока тепла. При расчете коэффициентов переноса, вязкость $\mu(\xi)$ и теплопроводность $\lambda(\xi)$ должны быть рассчитаны во втором и третьем приближениях соответственно. При этом порядки определителей в выражениях для $\mu(2)$ и $\lambda(3)$ оказываются одинаковыми, равными $2N$.

Описанную ситуацию отражает рис. 7, где в плоскости T и p показаны области $I-V$, отделенные линиями 1—4, указывающими границу

справа, до которой коэффициенты переноса $\lambda(\xi)$, $\mu(\xi)$, $k_{\text{т}}(\xi)$, $\varphi_{ij}(\xi)$ необходимо вычислить в заданных приближениях ξ , чтобы обеспечить вычисление эффективных коэффициентов в уравнениях переноса с точностью не хуже $\sim 5\%$ (аргументы (в круглых скобках) коэффициентов указывают номер приближения ξ). Как видно из номограммы, для частично ионизованного воздуха все без исключения коэффициенты переноса необходимо рассчитывать в высших приближениях, начиная только с области V .

ЛИТЕРАТУРА

1. Колесников А. Ф., Тирский Г. А. Уравнения гидродинамики для частично ионизованных многокомпонентных смесей газов с коэффициентами переноса в высших приближениях.— В кн.: Молекулярная газодинамика. М.: Наука, 1982.
2. Васильевский С. А., Соколова И. А., Тирский Г. А. Точные уравнения и коэффициенты переноса для многокомпонентной смеси газов и частично ионизованной плазмы.— ПМТФ, 1984, № 4.
3. Хаазе Р. Термодинамика необратимых процессов. М.: Мир, 1967.
4. Von R. Haase. Zur Thermodynamik der irreversibler Prozess. III.—Z. Naturforsch., 1953, N 8a.
5. Von J. Meixner. Zur Theorie der Wärmeleitfähigkeit reagierender fluider Mischungen.— Z. Naturforsch., 1953, N 7a.
6. Hirschfelder J. O. Heat transfer in chemical reaction mixtures.— J. Chem. Phys., 1957, v. 26, N 2.
7. Brokaw R. S. Thermal conductivity of gas mixtures in chemical equilibrium. 2.— J. Chem. Phys., 1960, v. 32, N 4.
8. Butler J. N., Brokaw R. S. Thermal conductivity of gas mixtures in chemical equilibrium.— J. Chem. Phys., 1957, v. 26, N 6.
9. Кринберг И. А. Влияние реакций ионизации на теплопроводность плазмы.— ТВТ, 1965, т. 3, № 6.
10. Лучина А. А. Влияние химических реакций на теплопроводность и диффузионные потоки в плазме.— ИФЖ, 1975, т. 29, № 4.
11. Тирский Г. А. Метод последовательных приближений для интегрирования ламинарного пограничного слоя с химическими реакциями, включая реакции ионизации. Отчет Ин-та механики МГУ, № 1016, 1969.
12. Суслов О. Н., Тирский Г. А., Щениников В. В. Описание химически равновесных течений многокомпонентных ионизованных смесей в рамках уравнений Навье—Стокса и Прандтля.— ПМТФ, 1971, № 1.
13. Герасимов Г. Я. Явления переноса в диссоциирующем газе.— Изв. АН СССР. МЖГ, 1981, № 4.
14. Герасимов Г. Я. Явления переноса в частично ионизованном газе с учетом реакции ионизации.— Изв. АН СССР. МЖГ, 1974, № 3.
15. Людвиг Г., Хейль М. Теория пограничного слоя с диссоциацией и ионизацией.— В кн.: Проблемы механики. М.: ИЛ, 1963, вып. 4.
16. Тирский Г. А. Гидродинамическое описание химически равновесных течений частично ионизованных неидеальных смесей газов.— В кн.: Некоторые вопросы механики сплошной среды. М.: Изд-во МГУ, 1978.
17. Казейкин С. Н. Расчет термодинамических и переносных свойств высокотемпературного воздуха. Препринт ИПМ АН СССР, № 108, 1978.
18. Суслов О. М. Многокомпонентная диффузия и теплообмен при обтекании тела химически равновесным ионизованным газом.— ПМТФ, 1972, № 3.
19. Васильевский С. А., Ефимова Л. Г. и др. Расчет коэффициентов переноса в многокомпонентной плазме в высших приближениях. Эффект разделения элементов в химически и ионизационно равновесной плазме. Отчет Ин-та механики МГУ, № 2427, 1980.

Поступила 27/IX 1984 г.

УДК 537.622:537.84

ВЛИЯНИЕ МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ТЕЙЛОРОВСКУЮ НЕУСТОЙЧИВОСТЬ В МАГНИТНЫХ ЖИДКОСТЯХ

A. Н. Вислович, В. А. Новиков, А. К. Синицын
(Минск)

При движении магнитной жидкости в магнитном поле вектор намагничивания отклоняется от равновесной ориентации, направленной вдоль поля. Взаимодействием неравновесной составляющей намагниченности с внешним магнитным полем обусловлен целый ряд гидродинамических эффектов, которые систематически рассмотрены,