

О МОДЕЛИ «ПОВЕРХНОСТИ РЕАКЦИЙ»  
В ТЕОРИИ ГОРЕНИЯ НЕПЕРЕМЕШАННЫХ ТОПЛИВ.  
МОЛЕКУЛЯРНО-КИНЕТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ В ОБЛАСТИ  
РЕАКЦИЙ

Н. К. МАКАШЕВ

(Москва)

Ранее в первой части настоящей работы (см. [1]) были рассмотрены основные характерные черты течения, возникающего при смешении двух потоков с компонентами, вступающими в необратимую химическую реакцию. Кроме того, была проанализирована величина основных погрешностей, возникающих в решении соответствующей газодинамической задачи при использовании тех или иных предположений. При этом оказалось, что влияние обычно неучитываемых слагаемых барнеттовского и супербарнеттовского типа в переносных свойствах (т.е. в тензоре напряжений, в векторах потока тепла и диффузии) в данной задаче может быть существенно сильнее, чем в обычных задачах на смешение.

Во второй части проведено молекулярно-кинетическое рассмотрение течения внутри тонкой области реакций. Эта область при получении «внешнего» решения задачи в слое смешения или при использовании классической модели «поверхности реакций» трактуется как некоторая поверхность в поле течения, на которой происходят все химические превращения компонентов газовой смеси. Получены уравнения газодинамики, описывающие основное и ряд последующих приближений в области реакций, и подтверждены соображения, высказанные в [1] о роли не навье-стоксовских членов в переносных свойствах.

1. Поставленную в [1] задачу о структуре области реакций будем решать с помощью кинетического уравнения Больцмана, сохранив при этом основные обозначения [1]. Необходимость в таком подходе обусловлена тем, что из-за весьма малой толщины области реакций и сильного изменения в ней градиентов гидродинамических величин (например, температуры или концентраций компонентов — продуктов реакции) уравнения, обладающие внутри нее точностью, соответствующей точности уравнений, описывающих слой смешения, могут содержать в себе слагаемые барнеттовского и последующих приближений, а эти слагаемые удобнее определить из решения кинетических уравнений. С другой стороны, специфические черты решения уравнения Больцмана в области реакций могут уточнить характер происходящих явлений.

Будем считать, что в потоке отсутствует разбавитель и при этом выполнены все условия образования в слое смешения узкой области реакций. Кроме этого, предположим, что  $Mt^{1/2} = O(1)$ . Прежде чем записывать уравнение Больцмана, отметим два существенных момента.

Во-первых, так как в узкой области реакций перенос компонентов осуществляется с существенно различными скоростями ( $v_y \sim \varepsilon^{1/2} \alpha^{1/2} c_s$  для реагентов,  $v_y \sim u_y \sim \varepsilon^{1/2} c_s$  для продуктов реакции;  $\varepsilon = l_s/L \ll 1$ ), течение характеризуется различными масштабами времени

$$(1.1) \quad \vartheta_0 \sim L/c_s, \quad \vartheta_1 \sim \vartheta_0 (\varepsilon/\alpha)^{1/2}, \quad \vartheta_2 \sim \vartheta_0 (\varepsilon/\alpha)^{2/3}$$

причем состояние компонентов — продуктов реакции — определяется лишь теми процессами, которые происходят на масштабах времени  $\vartheta_0$  и  $\vartheta_1$ .

Во-вторых, нетрудно показать, что в наиболее часто встречающемся случае смешения спутных потоков поправка к решению в области реакций за счет учета ее кривизны имеет величину порядка  $\varepsilon(\varepsilon/\alpha)^{1/2}$ . Следовательно, с большой точностью эффектами кривизны в области реакций можно пренебречь.

В координатах

$$t = t_0 \cdot \theta_2^{-1}, \quad x = x_0 \cdot L^{-1}, \quad y = y_0 \cdot \alpha^{1/2} t_0^{-1/2} L^{-1/2}$$

считая течение двумерным, а функции распределения молекул зависящими от вектора  $V$  с компонентами  $c_x V_x = \xi_x - u_x$ ,  $c_y V_y = \xi_y$ ,  $c_z V_z = \xi_z$ , где  $\xi_x$ ,  $\xi_y$ ,  $\xi_z$  — компоненты вектора скорости молекул, запишем внутри области реакций безразмерное уравнение Больцмана для продуктов реакции и реагентов соответственно в виде

$$(1.2) \quad \varepsilon^{1/2} \alpha^{2/3} \left[ \frac{\partial f_i}{\partial t} - \frac{\partial f_i}{\partial V_{ix}} \frac{\partial u_x}{\partial t} \right] + \varepsilon^{1/6} \alpha^{1/6} \left[ V_{iy} \frac{\partial f_i}{\partial y} - V_{iy} \frac{\partial f_i}{\partial V_{ix}} \frac{\partial u_x}{\partial y} \right] + \\ + \varepsilon \left[ u_x \frac{\partial f_i}{\partial x} + V_{ix} \frac{\partial f_i}{\partial x} - u_x \frac{\partial u_x}{\partial x} \frac{\partial f_i}{\partial V_{ix}} - V_{ix} \frac{\partial u_x}{\partial x} \frac{\partial f_i}{\partial V_{ix}} \right] = \\ = \sum_j \frac{1}{2} J_{ij}^e(f, f) + \left( \frac{\varepsilon}{\alpha} \right)^{1/2} \sum_r \frac{1}{2} J_{ir}^e(f, f) + \varepsilon^{2/3} \alpha^{1/3} \frac{1}{2} J_{ir}^R(f, f)$$

$$(1.3) \quad \varepsilon^{1/2} \alpha^{2/3} \left[ \frac{\partial f_\beta}{\partial t} - \frac{\partial f_\beta}{\partial V_{\beta x}} \frac{\partial u_x}{\partial t} \right] + \varepsilon^{1/6} \alpha^{1/6} \left[ V_{\beta y} \frac{\partial f_\beta}{\partial y} - V_{\beta y} \frac{\partial f_\beta}{\partial V_{\beta x}} \frac{\partial u_x}{\partial y} \right] + \\ + \varepsilon \left[ u_x \frac{\partial f_\beta}{\partial x} + V_{\beta x} \frac{\partial f_\beta}{\partial x} - u_x \frac{\partial u_x}{\partial x} \frac{\partial f_\beta}{\partial V_{\beta x}} - V_{\beta x} \frac{\partial u_x}{\partial x} \frac{\partial f_\beta}{\partial V_{\beta x}} \right] = \\ = \sum_j \frac{1}{2} J_{\beta j}^e(f, f) + \left( \frac{\varepsilon}{\alpha} \right)^{1/2} \sum_r \frac{1}{2} J_{\beta r}^e(f, f) + \varepsilon^{1/3} \alpha^{2/3} \frac{1}{2} J_{\beta r}^R(f, f)$$

Здесь  $1/2 J_{ij}^e$ ,  $1/2 J_{ir}^e$ ,  $1/2 J_{\beta j}^e$ ,  $1/2 J_{\beta r}^e$  — интегралы упругих столкновений. В интегралах неупругих столкновений  $1/2 J_{ir}^R$  и  $1/2 J_{\beta r}^R$  для общности будем учитывать слагаемые, ответственные как за прямую, так и за обратную реакции (см. [1]). Индексы  $\beta$ ,  $\gamma$  относятся к реагентам,  $i$ ,  $j$  — к продуктам реакции.

Систему уравнений (1.2) и (1.3) будем решать методом Чепмена — Энскога, обобщение которого на случай неоднородной метрики течения дано в [2]. Для простоты параметр  $\alpha$  будем считать величиной порядка единицы. Если в реальном течении  $\alpha \ll 1$ , то получившееся решение легко может быть разложено по  $\alpha$ . Для  $\alpha = O(1)$  асимптотическое разложение решения для функций распределения компонентов осуществляется по степеням  $\varepsilon^{1/6}$

$$(1.4) \quad f = f_0 (1 + \varepsilon^{1/6} \varphi_1 + \varepsilon^{1/3} \varphi_2 + \varepsilon^{1/2} \varphi_3 + \dots)$$

Соответственно в виде разложения по  $\varepsilon^{1/6}$  представим операторы дифференцирования по  $t$  и  $y$

$$(1.5) \quad \frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial_0}{\partial t} + \varepsilon^{1/6} \frac{\partial_1}{\partial t} + \varepsilon^{1/3} \frac{\partial_2}{\partial t} + \dots, \quad \frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial_0}{\partial y} + \varepsilon^{1/6} \frac{\partial_1}{\partial y} + \varepsilon^{1/3} \frac{\partial_2}{\partial y} + \dots$$

Подставив (1.4), (1.5) в уравнения (1.2), (1.3), нетрудно установить следующие основные особенности получаемого решения:

а) в соответствии с видом уравнений для главных членов разложения  $f_i$  и  $f_\beta$ , а также видом линейных интегральных операторов уравнений для

следующих членов разложения функций распределения решение может быть построено так, что все макроскопические величины, за исключением концентраций реагентов  $n_\beta$ , определяются по  $f_i$ , причем  $n_i$ ,  $T$  и  $u_x$  определяются по главному члену разложения  $f_i$ , т. е. по  $f_{i0}$  и  $u_y$  — по четвертому члену разложения  $f_{i0}\Phi_{i3}$ . Соответственно концентрации  $n_\beta$  определяются по главному члену разложения  $f_\beta$  — по  $f_{\beta 0}$ ;

б) главные члены разложения функций распределения имеют вид (в дальнейшем переходим к размерным величинам)

$$(1.6) \quad f_{i0} = n_i \left( \frac{m_i}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp \left( -\frac{m_i V_i^2}{2kT} \right), \quad f_{\beta 0} = n_\beta \left( \frac{m_\beta}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp \left( -\frac{m_\beta V_\beta^2}{2kT} \right)$$

$$V = (\xi_x - u_x, \xi_y, \xi_z)$$

т. е. содержат лишь одну температуру  $T$  и одну продольную компоненту среднемассовой скорости  $u_x$ ;

в) из условий разрешимости уравнений для членов разложения  $f_i$  определяются результаты действия операторов  $\partial_n/\partial t$  и  $\partial_n/\partial y$  на все величины, кроме концентраций реагентов  $n_\beta$ , для которых соответствующие выражения определяются из условий разрешимости уравнений для членов разложения  $f_\beta$ . Эти уравнения содержат вырожденный интегральный оператор вида

$$(1.7) \quad \int f_{\beta 0} f_{j0} (\Phi_\beta' - \Phi_\beta) g_{\beta j} d\sigma_{\beta j} dV_j$$

который обладает лишь одним собственным решением — произвольной функцией  $\Phi_\beta^0$ , не зависящей от скорости молекул.

г) поскольку концентрации компонентов — продуктов реакции  $n_i$ , температура газа в целом  $T$  и среднемассовая скорость  $u$  определяются по  $f_i$ , то в соответствии со сказанным выше относительно временных масштабов (1.1), на которых изменяются функции распределения, и разложением по  $\epsilon^{1/2}$  оператора  $\partial/\partial t$  (1.5) можно считать, что выполняются равенства

$$(1.8) \quad \frac{\partial_0 n_i}{\partial t} = \frac{\partial_1 n_i}{\partial t} = 0, \quad \frac{\partial_2 n_i}{\partial t} \neq 0$$

$$\frac{\partial_0 u}{\partial t} = \frac{\partial_1 u}{\partial t} = 0, \quad \frac{\partial_2 u}{\partial t} \neq 0$$

$$\frac{\partial_0 T}{\partial t} = \frac{\partial_1 T}{\partial t} = 0, \quad \frac{\partial_2 T}{\partial t} \neq 0$$

Приступим теперь к нахождению решения для  $f_i$  и  $f_\beta$  и соответствующих этому решению газодинамических уравнений.

Уравнение для второго члена в разложении  $f_i - f_{i0}\Phi_{i1}$

$$V_{iy} \frac{\partial_0 f_{i0}}{\partial y} - V_{iy} \frac{\partial f_{i0}}{\partial V_{ix}} \frac{\partial_0 u_x}{\partial y} = \sum_i J_{ij}^\epsilon(f_0, f_0\Phi_1)$$

преобразованное с учетом условия его разрешимости  $\partial_0 p_{ij}/\partial y = 0$ ,  $p_{ij} = p_i + p_j$ , где  $p_i = n_i kT$  — парциальное давление  $i$ -го компонента смеси, имеет вид

$$(1.9) \quad f_{i0} \left[ \left( \frac{m_i V_i^2}{2kT} - \frac{5}{2} \right) V_{iy} \frac{\partial_0 \ln T}{\partial y} + \frac{n_{ij}}{n_i} V_{iy} \frac{\partial_0 n_i}{\partial y} \frac{n_i}{n_{ij}} + \frac{m_i}{kT} V_{ix} V_{iy} \frac{\partial_0 u_x}{\partial y} \right] =$$

$$= \sum_j J_{ij}^\epsilon(f_0, f_0\Phi_1), \quad n_{ij} = n_i + n_j$$

Его решение может быть представлено следующим образом:

$$(1.10) \quad \Phi_{i1} = -A_i V_{iy} \frac{\partial_0 \ln T}{\partial y} - B_i V_{ix} V_{iy} \frac{\partial_0 u_x}{\partial y} - C_i V \frac{\partial_0 n_i}{\partial y n_{ij}}$$

причем функции  $A_i$  и  $C_i$  могут быть выбраны так, чтобы соответствующие члены не давали вклада в среднюю скорость газа (т. е. в компоненту  $u_y$ ),

Соотношения, определяющие величины  $\partial_0 \ln T / \partial y$ ,  $\partial_0 u_x / \partial y$  и  $\partial_0 (n_i / n_{ij}) / \partial y$ , следуют из условий разрешимости уравнений для  $f_{i0} \Phi_{i2}$

$$(1.11) \quad V_{iy} \frac{\partial_0 f_{i0} \Phi_{i1}}{\partial y} + V \frac{\partial_1 f_{i0}}{\partial y} - V \frac{\partial f_{i0} \Phi_{i1}}{\partial V_{ix}} \frac{\partial_0 u_x}{\partial y} - V \frac{\partial f_{i0}}{\partial V_{ix}} \frac{\partial_1 u_x}{\partial y} - \\ - \frac{1}{2} \sum_j J_{ij}^e(f_0 \Phi_1, f_0 \Phi_1) = \sum_j J_{ij}^e(f_0, f_0 \Phi_2)$$

Умножая (1.11) на инварианты упругих столкновений, интегрируя по скоростям и суммируя результаты по  $i$  (кроме результата умножения на единицу), получим

$$(1.12) \quad \frac{\partial_0}{\partial y} \left( n_i D_i \frac{\partial_0 n_i}{\partial y n_{ij}} + n_i D_i^T \frac{\partial_0}{\partial y} \ln T \right) = 0 \\ \frac{\partial_0}{\partial y} \mu_{ij} \frac{\partial_0 u_x}{\partial y} = 0, \quad \frac{\partial_1 p_{ij}}{\partial y} = 0 \\ \frac{\partial_0}{\partial y} \left( \lambda_{ij}^T \frac{\partial_0}{\partial y} \ln T + \lambda_{ij}^D \frac{\partial_0 n_i}{\partial y n_{ij}} \right) + \mu_{ij} \left( \frac{\partial_0 u_x}{\partial y} \right)^2 = 0$$

Здесь  $D_i$ ,  $D_i^T$ ,  $\mu_{ij}$ ,  $\lambda_{ij}^T$  и  $\lambda_{ij}^D$  — коэффициенты диффузии, термодиффузии, вязкости, теплопроводности и диффузионной теплопроводности в газе, состоящем из одних продуктов реакции.

Подставляя в (1.12) определение операторов  $\partial_0 / \partial y$  от макроскопических величин (1.5), отбрасывая члены более высокого порядка, интегрируя результат по  $y$  и срачивая с решением в слое смешения, найдем

$$(1.13) \quad \frac{\partial}{\partial y} \frac{n_i}{n_{ij}} = 0, \quad \frac{\partial_0 T}{\partial y} = 0, \quad \frac{\partial_0 u_x}{\partial y} = 0$$

Приняв во внимание условие разрешимости для  $\Phi_{i1}$ , несложно получить и более сильное равенство, справедливое для концентраций продуктов реакции  $\partial_0 n_i / \partial y = 0$ .

Таким образом, видим, что в действительности функции  $\Phi_{i1}$  равны нулю. Для функций  $\Phi_{i2}$  в результате получаются уравнения, совпадающие по виду с уравнениями (1.9) для  $\Phi_{i1}$ . Разница заключается лишь в «номере» входящих в уравнения дифференциальных операторов.

Соответственно аналогичным (1.10) будет и вид решения уравнения (1.11)

$$\Phi_{i2} = -A_i V_{iy} \frac{\partial_1 \ln T}{\partial y} - B_i V_{ix} V_{iy} \frac{\partial_1 u_x}{\partial y} - C_i V_{iy} \frac{\partial_1 n_i}{\partial y n_{ij}}$$

Условия разрешимости уравнения для  $\Phi_{i3}$

$$(1.14) \quad V_{iy} \frac{\partial_0 f_{i0} \Phi_{i2}}{\partial y} + V_{iy} \frac{\partial_2 f_{i0}}{\partial y} - V_{iy} \frac{\partial f_{i0}}{\partial V} \frac{\partial_2 u_x}{\partial y} - \sum_{\tau} J_{i\tau}^e(f_0, f_0 \Phi_1) = \\ = \sum_j J_{ij}^e(f_0, f_0 \Phi_3)$$

позволяют определить величины  $\partial_1 \ln T / \partial y$ ,  $\partial_1 u_x / \partial y$ ,  $\partial_1 (n_i / n_{ij}) / \partial y$ . Однако для получения всех условий разрешимости необходимо предварительно найти второй член в разложении  $f_\beta$ , т. е.  $f_{\beta 0} \Phi_{\beta 1}$ , уравнение для которого с учетом (1.7) и (1.12) может быть записано следующим образом:

$$(1.15) \quad V_{\beta v} \frac{\partial f_{\beta 0}}{\partial y} = f_{\beta 0} \frac{n_{ij}}{n_\beta} V_{\beta v} \frac{\partial_0 n_\beta}{\partial y n_{ij}} = \sum_j \int f_{\beta 0} f_{j 0} (\Phi_{\beta 1}' - \Phi_{\beta 1}) g_{\beta j} d\sigma_{\beta j} dV_j$$

Условия разрешимости этих уравнений выполняются тождественно, а решение имеет вид

$$(1.16) \quad \Phi_{\beta 1} = -C_\beta V_{\beta v} \frac{\partial_0 n_\beta}{\partial y n_{ij}}$$

причем, как нетрудно установить,  $C_\beta \sim n_\beta^{-1}$ .

С учетом (1.16) условия разрешимости уравнения (1.14) принимают вид, близкий к (1.12)

$$(1.17) \quad \begin{aligned} & \frac{\partial_0}{\partial y} \left( n_i D_i \frac{\partial_1 n_i}{\partial y n_{ij}} + n_i D_i^T \frac{\partial_1 \ln T}{\partial y} \right) = 0 \\ & \frac{\partial_0}{\partial y} \mu_{ij} \frac{\partial_1 u_x}{\partial y} = 0, \quad \frac{\partial_0}{\partial y} \left( \lambda_{ij}^T \frac{\partial_1 \ln T}{\partial y} + \lambda_{ij}^D \frac{\partial_1 n_i}{\partial y n_{ij}} \right) = 0 \\ & \frac{\partial_2}{\partial y} p_{ij} + \sum_{\tau, i} m_i \int f_{i 0} f_{\tau 0} V_{i v} (C_\tau' V_{\tau v}' - C_\tau V_{\tau v}) g_{i \tau} d\sigma_{i \tau} dV_i dV_\tau \frac{\partial_0 n_\tau}{\partial y n_{ij}} = 0 \end{aligned}$$

Из первых трех соотношений и равенства  $\partial_1 p_{ij} / \partial y = 0$  точно так же, как и ранее, можно установить, что

$$(1.18) \quad \partial_1 n_i / \partial y = 0, \quad \partial_1 T / \partial y = 0, \quad \partial_1 u_x / \partial y = 0$$

и, следовательно, функции  $\Phi_{i2}$ , как и  $\Phi_{i1}$  равны нулю, а разложение функции распределения продуктов реакции  $f_i$  в области реакций начинается с функций  $\Phi_{i3}$ , удовлетворяющих уравнениям

$$(1.19) \quad \begin{aligned} & f_{i 0} \left[ \left( \frac{m_i V_i^2}{2kT} - \frac{5}{2} \right) V_{i v} \frac{\partial_2 \ln T}{\partial y} + \frac{m_i}{kT} V_{i x} V_{i v} \frac{\partial_2 u_x}{\partial y} + \frac{n_{ij}}{n_i} V_{i v} \frac{\partial_2 n_i}{\partial y n_{ij}} - \right. \\ & \left. - \frac{V_{i v}}{p_{ij}} \sum_{\tau, i} m_i \int f_{i 0} f_{\tau 0} V_{i v} (C_\tau' V_{\tau v}' - C_\tau V_{\tau v}) g_{i \tau} d\sigma_{i \tau} dV_i dV_\tau \frac{\partial_0 n_\tau}{\partial y n_{ij}} \right] + \\ & + \sum_\tau \int f_{i 0} f_{\tau 0} (C_\tau' V_{\tau v}' - C_\tau V_{\tau v}) g_{i \tau} d\sigma_{i \tau} dV_i dV_\tau \frac{\partial_0 n_\tau}{\partial y n_{ij}} = \sum_j J_{ij}^e (f_0, f_0 \Phi_3) \end{aligned}$$

Решение (1.19) можно записать в виде

$$(1.20) \quad \begin{aligned} \Phi_{i3} = & -A_i V_{i v} \frac{\partial_2 \ln T}{\partial y} - B_i V_{i x} V_{i v} \frac{\partial_2 u_x}{\partial y} - C_i V_{i v} \frac{\partial_2 n_i}{\partial y n_{ij}} - \\ & - \sum_\tau d_{i \tau} V_{i v} \frac{\partial_0 n_\tau}{\partial y n_{ij}} + \frac{m_i}{kT} V_{i v} u_y \end{aligned}$$

где функции  $A_i$ ,  $B_i$  и  $C_i$  определены выше, а функции  $d_{i \tau}$  строятся таким образом, чтобы скомпенсировать вклад  $\Phi_{\beta 1}$  в составляющую среднemasсовой скорости  $u_y$ . Для этого необходимо, чтобы выполнялось равенство

$$(1.21) \quad \sum_i \int f_{i 0} d_{i \tau} V_i^2 dV_i + m_\tau \int f_{\tau 0} C_\tau V_\tau^2 dV_\tau = 0$$

Отметим, что поскольку  $C_\beta \sim n_\beta^{-1}$ , то из уравнений (1.19) нетрудно заключить, что функции  $d_{i\tau}$  не зависят от концентраций реагентов в области реакций, где строится решение.

Рассмотрим еще вопрос об изменении по  $y$  давления газовой смеси. Интегрирование (1.15) по скоростям после умножения на  $m_\beta V_{\beta y}$  и суммирование по индексу  $\beta$  приводят к результату

$$\frac{\partial_0 p_{\beta\tau}}{\partial y} + \sum_{\tau,i} m_\tau \int f_{\tau 0} f_{i 0} V_{\tau y} (C_\tau' V_{\tau y}' - C_\tau V_{\tau y}) g_{\tau i} d\sigma_{\tau i} dV_i dV_\tau \times \\ \times \frac{\partial_0 n_\tau}{\partial y n_{ij}} = 0$$

сопоставляя который с последним из соотношений (1.17), можно найти, что  $\partial_0 p_{\beta\tau}/\partial y + \partial_2 p_{ij}/\partial y = 0$ ,  $p_{\beta\tau} = p_\beta + p_\tau$ .

С помощью определения операторов  $\partial_k/\partial y$  от макроскопических величин (1.5) и с учетом соотношения между концентрациями реагентов и продуктов реакции, в силу которого  $n_{\beta,\tau} = O(\epsilon^{1/2} n_{i,j})$ , величина градиента по  $y$  давления газа  $p = p_{ij} + p_{\beta\tau}$  может быть выражена следующим образом:

$$(1.22) \quad \partial p/\partial y = \partial_0 p_{ij}/\partial y + \partial_1 p_{ij}/\partial y + (\partial_2 p_{ij}/\partial y + \partial_0 p_{\beta\tau}/\partial y) + \dots$$

Отсюда следует, что в рассмотренном приближении давление  $p$  постоянно поперек области реакций, поскольку все выписанные здесь слагаемые равны нулю.

Уравнение для  $\Phi_{\beta 2}$  имеет вид

$$V_{\beta y} \frac{\partial_0 f_{\beta 0} \Phi_{\beta 1}}{\partial y} + V_{\beta y} \frac{\partial_1 f_{\beta 0}}{\partial y} + \frac{\partial_0 f_{\beta 0}}{\partial t} - \frac{1}{2} J_{\beta}^R(f_0, f_0) = \\ = \sum_j J_{\beta j}^e(f_0, f_0 \Phi_2)$$

Оно позволяет установить соотношения, описывающие в главном приближении поведение концентраций реагентов в области реакций (переход от  $\partial_k/\partial t$  и  $\partial_k/\partial y$  к дифференциальным операторам  $\partial/\partial t$  и  $\partial/\partial y$  осуществляется согласно определениям (1.5) и в дальнейшем особо не оговаривается)

$$(1.23) \quad \frac{\partial_0 n_\beta}{\partial t} = n_{ij} D_\beta \frac{\partial_0^2 n_\beta}{\partial y^2 n_{ij}} + R_{\beta 0}, \quad R_{\beta 0} = \int \frac{1}{2} J_{\beta}^R(f_0, f_0) dV_\beta,$$

$$3n_{ij} D_\beta = \int f_{\beta 0} C_\beta V_\beta^2 dV_\beta$$

Здесь  $D_\beta$  — коэффициент диффузии  $\beta$ -молекул в газе из продуктов реакции,  $R_{\beta 0}$  — главный член в разложении объемной скорости образования  $\beta$ -молекул в результате химической реакции.

Подставляя (1.23) в уравнение для  $\Phi_{\beta 2}$ , получим

$$(1.24) \quad f_{\beta 0} \left\{ V_{\beta y} \frac{n_{ij}}{n_\beta} \frac{\partial_1 n_\beta}{\partial y n_{ij}} - \left[ C_\beta \left( V_{\beta y}^2 - \frac{1}{3} V_\beta^2 \right) + \frac{C_\beta V_\beta^2}{3} - \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{n_{ij}}{n_\beta} D_\beta \right] \frac{\partial_0^2 n_\beta}{\partial y^2 n_{ij}} + \frac{R_{\beta 0}}{n_\beta} \right\} - \frac{1}{2} J_{\beta}^R(f_0, f_0) = \\ = \sum_j J_{\beta j}^e(f_0, f_0 \Phi_2)$$

Соответственно функцию  $\Phi_{\beta 2}$  можно представить следующим образом:

$$(1.25) \quad \Phi_{\beta 2} = -C_{\beta} V_{\beta y} \frac{\partial_1 n_{\beta}}{\partial y n_{ij}} + \left[ Q_{\beta}^{(1)} \left( V_{\beta y}^2 - \frac{1}{3} V_{\beta}^2 \right) + Q_{\beta}^{(2)} \right] \times \\ \times \frac{\partial_0^2 n_{\beta}}{\partial y^2 n_{ij}} + G_{\beta}$$

поскольку согласно [3] неприводимые тензорные полиномы ( $V_{\beta y}$  и  $(V_{\beta y}^2 - V_{\beta}^2/3)$ ) — отдельные компоненты двух из них) воспроизводятся при действии на них центрально-симметричного интегрального оператора, аналогичного оператору уравнения (1.24).

В соответствии с требованием об отсутствии вклада  $\Phi_{\beta 2}$  в  $n_{\beta}$  функции  $Q_{\beta}^{(2)}$  и  $G_{\beta}$  должны быть подобраны так, чтобы

$$\int f_{\beta 0} G_{\beta} dV_{\beta} = 0, \quad \int f_{\beta 0} Q_{\beta}^{(2)} dV_{\beta} = 0$$

Из уравнений для  $Q_{\beta}^{(1)}$  и  $Q_{\beta}^{(2)}$  можно установить, что  $Q_{\beta}^{(1)} \sim n_{\beta}^{-1}$ . Слагаемое  $G_{\beta}$  зависит от  $n_{\beta}$  более сложным образом.

Уравнения, описывающие в главном приближении структуру области реакций и дополняющие соотношения (1.23), получаются из условий разрешимости уравнений для  $\Phi_{i4}$

$$(1.26) \quad V_{iy} \frac{\partial_0 f_{i0} \Phi_{i3}}{\partial y} + V_{iy} \frac{\partial_3 f_{i0}}{\partial y} - V_{iy} \frac{\partial f_{i0}}{\partial V_{ix}} \frac{\partial_3 u_x}{\partial y} + \frac{\partial_2 f_{i0}}{\partial t} - \\ - \frac{\partial f}{\partial V_{ix}} \frac{\partial_2 u_x}{\partial t} - \sum_{\gamma} J_{i\gamma}^e(f_0, f_0 \Phi_2) - \frac{1}{2} J_i^R(f_0, f_0) = \\ = \sum_j J_{ij}^e(f_0, f_i \Phi_i)$$

которые с учетом (1.6) и (1.20) имеют вид

$$(1.27) \quad \frac{\partial_2 n_i}{\partial t} + n_i \frac{\partial_0 u_y}{\partial y} = R_{i0} + n_i D_i \frac{\partial_0}{\partial y} \frac{\partial_2 n_i}{\partial y n_{ij}} + \frac{n_i D_i^T \partial_0}{T} \frac{\partial_2 T}{\partial y} + \\ + n_i \sum_{\gamma} D_{i\gamma} \frac{\partial_0^2 n_{\gamma}}{\partial y^2 n_{ij}} \\ \rho_{ij} \frac{\partial_2 u_x}{\partial t} = \mu_{ij} \frac{\partial_0}{\partial y} \frac{\partial_2 u_x}{\partial y}, \quad \rho_{ij} = m_i n_i + m_j n_j \\ \frac{\partial_3 p_{ij}}{\partial y} + \sum_{\gamma, i} m_i \int f_{i0} f_{\gamma 0} V_{iy} (C_{\gamma}' V_{\gamma y}' - C_{\gamma} V_{\gamma y}) g_{i\gamma} d\sigma_{i\gamma} dV_{\gamma} dV_i \times \\ \times \frac{\partial_1 n_{\gamma}}{\partial y n_{ij}} = 0 \\ \frac{3}{2} k n_{ij} \frac{\partial_2 T}{\partial t} = -n_{ij} k T \frac{\partial_0 u_y}{\partial y} - \frac{3}{2} k T \sum_i R_{i0} - \frac{3}{2} k T \sum_i \left( n_i D_i \times \right. \\ \left. \times \frac{\partial_0}{\partial y} \frac{\partial_2 n_i}{\partial y n_{ij}} + \frac{n_i D_i^T \partial_0}{T} \frac{\partial_2 T}{\partial y} + n_i \sum_{\gamma} D_{i\gamma} \frac{\partial_0^2 n_{\gamma}}{\partial y^2 n_{ij}} \right) + \frac{\lambda_{ij}^T \partial_0}{T} \frac{\partial_2 T}{\partial y} +$$

$$\begin{aligned}
 & + \lambda_{ij}^D \frac{\partial_0}{\partial y} \frac{\partial_2}{\partial y} \frac{n_i}{n_{ij}} + \sum_{\tau} \lambda_{ij\tau}^D \frac{\partial_0^2}{\partial y^2} \frac{n_{\tau}}{n} + \sum_i \int \frac{m_i V_i^2}{2} \frac{1}{2} J_i^R(f_0, f_0) \times \\
 & \times dV_i + \sum_{\tau, i} \int \frac{m_i V_i^2}{2} J_{i\tau}^e(f_0, f_0 \Phi_2) dV_i \\
 & 3n_i D_{i\tau} = \int f_{i0} d_{i\tau} V_i^2 dV_i, \quad 6\lambda_{ij\tau}^D = \sum_i m_i \int f_{i0} d_{i\tau} V_i^4 dV_i
 \end{aligned}$$

Соотношения, определяющие уравнения неразрывности и сохранения энергии, получаются с помощью условий (1.27), а также уравнения для  $\Phi_{\beta 2}$  и условий (1.23)

$$\begin{aligned}
 (1.28) \quad & \frac{\partial_2 \rho_{ij}}{\partial t} + \frac{\partial_0 \rho_{\beta\tau}}{\partial t} + \rho_{ij} \frac{\partial_0 u_y}{\partial y} = 0, \quad \rho_{\beta\tau} = m_{\beta} n_{\beta} + m_{\tau} n_{\tau} \\
 & \frac{3}{2} k n_{ij} \frac{\partial_2 T}{\partial t} = -n_{ij} k T \frac{\partial_0 u_y}{\partial y} - \frac{3}{2} k T \left[ \sum_i \left( n_i D_i \frac{\partial_0}{\partial y} \frac{\partial_2}{\partial y} \frac{n_i}{n_{ij}} + \right. \right. \\
 & \left. \left. + \frac{n_i D_i^T}{T} \frac{\partial_0}{\partial y} \frac{\partial_2 T}{\partial y} + n_i \sum_{\tau} D_{i\tau} \frac{\partial_0^2}{\partial y^2} \frac{n_{\tau}}{n_{ij}} \right) + \right. \\
 & \left. + n_{ij} \sum_{\tau} D_{\tau} \frac{\partial_0^2}{\partial y^2} \frac{n_{\tau}}{n_{ij}} \right] + \frac{\lambda_{ij}^T}{T} \frac{\partial_0}{\partial y} \frac{\partial_2 T}{\partial y} + \\
 & + \lambda_{ij}^D \frac{\partial_0}{\partial y} \frac{\partial_2}{\partial y} \frac{n_i}{n_{ij}} + \sum_{\tau} \lambda_{ij\tau}^D \frac{\partial_0^2}{\partial y^2} \frac{n_{\tau}}{n_{ij}} + \sum_{\tau} \lambda_{\tau}^D \frac{\partial_0^2}{\partial y^2} \frac{n_{\tau}}{n_{ij}} + Q R_{i0}
 \end{aligned}$$

Здесь  $Q = E_{\beta} + E_{\tau} - E_i - E_j$  — тепловой эффект реакции;  $E_i$  — энергия образования  $i$ -молекулы;  $6\lambda_{ij\tau}^D = m_{\tau} \int f_{\tau 0} C_{\tau} V_{\tau}^4 dV_{\tau}$ .

Из (1.27) и (1.28) следует, что в стационарном случае  $\partial_0 u_y / \partial y = 0$ ,  $(\partial_0 / \partial y) (\partial_2 u_x / \partial y) = 0$ , иными словами, нормальная составляющая скорости и тензор касательных напряжений в главном приближении постоянны поперек области реакций. Из уравнения сохранения энергии (1.28) и частиц сорта  $i$  видно, что химическая реакция и тепловыделение в ходе ее протекания приводят к «скачкам» производных от температуры и концентраций компонентов — продуктов реакции при переходе через «поверхность реакции» в соответствующей модели. Заметим, что поскольку в области реакций происходит резкое изменение не самих макроскопических величин, связанных с  $f_i$ , а лишь их производных, то операторы  $\partial_n / \partial y$  от этих величин нельзя считать перестановочными.

Уравнения, полученные здесь для структуры области реакций, совпадают в стационарном случае по своему виду с уравнениями, используемыми в [4] для решения аналогичной задачи. Уточнение имеет место лишь для коэффициентов переноса.

2. Приступим теперь к анализу следующих приближений к решению уравнения Больцмана, чтобы установить точность выписанной выше системы уравнений главного приближения.

Из уравнения для  $\Phi_{\beta 2}$  нетрудно получить, что

$$\frac{\partial_1}{\partial y} p_{\beta\gamma} + \sum_{\tau, i} \int f_{i0} f_{\tau 0} m_{\tau} V_{\tau y} (C_{\tau}' V_{\tau y}' - C_{\tau} V_{\tau y}) g_{i\tau} d\sigma_{i\tau} dV_i dV_{\tau} \frac{\partial_1}{\partial y} \frac{n_{\tau}}{n_{ij}} = 0$$

Сопоставляя этот результат с соответствующим условием разрешимости уравнения (1.26), находим

$$\partial_3 p_{ij} / \partial y + \partial_1 p_{\beta\gamma} / \partial y = 0$$

т. е. в разложении градиента давления по координате  $y$  (1.22) четвертый член также равен нулю.

Преобразуем с учетом условий разрешимости (1.27) неоднородную часть уравнения (1.26) и, опуская громоздкие, но несложные выкладки, приведем структурный вид решения этого уравнения, который может быть установлен по виду его неоднородной части

$$(2.1) \quad \begin{aligned} \varphi_{i4} = & -A_i V_{iy} \frac{\partial_3 \ln T}{\partial y} - B_i V_{ix} V_{iy} \frac{\partial_3 u_x}{\partial y} - C_i V_{iy} \frac{\partial_3 n_i}{\partial y n_{ij}} - \\ & - \sum_{\gamma} d_{i\gamma} V_{iy} \frac{\partial_1 n_{\gamma}}{\partial y n_{ij}} - B_i \left( V_{iy}^2 - \frac{1}{3} V_i^2 \right) \frac{\partial_0 u_y}{\partial y} + \\ & + \left[ BB_i \left( V_{iy}^2 - \frac{V_i^2}{5} \right) V_{ix} + GB_i V_{ix} \right] \frac{\partial_0}{\partial y} \frac{\partial_2 u_x}{\partial y} + \\ & + \left[ AA_i \left( V_{iy}^2 - \frac{V_i^2}{3} \right) + GA_i \right] \frac{\partial_0}{\partial y} \frac{\partial_2 T}{\partial y} + \left[ CC_i \left( V_{iy}^2 - \frac{V_i^2}{3} \right) + \right. \\ & \left. + GC_i \right] \frac{\partial_0}{\partial y} \frac{\partial_2 n_i}{\partial y n_{ij}} + \sum_{\gamma} \left[ dd_{i\gamma} \left( V_{iy}^2 - \frac{V_i^2}{3} \right) + Gd_{i\gamma} \right] \frac{\partial_0^2 n_{\gamma}}{\partial y^2 n_{ij}} + GR_i \end{aligned}$$

При определении входящих в (2.1) функций необходимо учитывать структурный вид члена в разложении функции распределения реагентов  $f_{\beta}$ , имеющего величину порядка  $\varepsilon^4$ , т. е.  $f_{\beta 0} \Phi_{\beta 2}$ : вклад от  $\Phi_{\beta 2}$  в температуру газа должен быть скомпенсирован за счет соответствующего выбора  $Gd_{i\gamma}$  и  $GR_i$

$$\begin{aligned} \sum_i \int f_{i0} GR_i m_i V_i^2 dV_i + \sum_{\beta} \int f_{\beta 0} G_{\beta} m_{\beta} V_{\beta}^2 dV_{\beta} = 0 \\ \sum_i \int f_{i0} Gd_{i\gamma} m_i V_i^2 dV_i + m_{\gamma} \int f_{\gamma 0} Q_{\gamma}^{(2)} V_{\gamma}^2 dV_{\gamma} = 0 \end{aligned}$$

Кроме того, должны выполняться условия

$$\int f_{i0} Gd_{i\gamma} dV_i = 0, \quad \int f_{i0} GR_i dV_i = 0$$

Остальные коэффициенты в (2.1) выбираются стандартно из условий отсутствия вклада  $\varphi_{i4}$  в  $u_y$  (это  $A_i, C_i$ ),  $u_x$  ( $GB_i$ ), в  $n_i$  и  $T$  ( $GA_i, GC_i$ ). По виду уравнений для коэффициентов в (2.1) можно установить, что все они, за исключением  $GR_i$ , не зависят от концентраций реагентов  $n_{\beta}$ .

Из (1.25) и (2.1) видно, что в функции  $\Phi_{\beta 2}$  и  $\varphi_{i4}$  помимо чисто навье-стоксовских входят и барнеттовские члены, дающие вклад в диагональные элементы тензора напряжений и (в  $\varphi_{i4}$  только) в компоненту по оси  $x$  вектора потока тепла и диффузионной скорости. По тому, как последние из перечисленных величин входят в уравнения сохранения, можно сделать вывод о том, что они не так важны, как первые. Вклад от  $\varphi_{i4}$  и  $\Phi_{\beta 2}$  в тензор напряжений делает, как будет показано ниже, отличным от нуля член порядка  $\varepsilon^{5/2}$  в разложении градиента давления по  $y$ , т. е. давление изменяется поперек области реакций на величину порядка  $\varepsilon^{5/2}$ , что существенно больше перепада давления в слое смешения на таком же расстоянии и даже на полной толщине слоя смешения (первая из упомянутых величин  $\sim \varepsilon^{1/2}$ , а вторая  $\sim \varepsilon$ ), если в нем отсутствует поверхность реакций.

Определим теперь вид решения уравнения для  $\Phi_{\beta 2}$

$$(2.2) \quad \begin{aligned} V_{\beta y} \frac{\partial_0 f_{\beta 0} \Phi_{\beta 2}}{\partial y} + V_{\beta y} \frac{\partial_1 f_{\beta 0} \Phi_{\beta 1}}{\partial y} + V_{\beta y} \frac{\partial_2 f_{\beta 0}}{\partial y} - V_{\beta y} \frac{\partial f_{\beta 0}}{\partial V_{\beta x}} \frac{\partial_2 u_x}{\partial y} + \frac{\partial_1 f_{\beta 0}}{\partial t} + \\ + \frac{\partial_0 f_{\beta 0} \Phi_{\beta 1}}{\partial t} - \sum_{\gamma} J_{\beta\gamma}^e(f_0, f_0 \Phi_1) - J_{\beta}^R(f_0, f_0 \Phi_1) = \sum_j J_{\beta j}^e(f_0, f_0 \Phi_3) \end{aligned}$$

Условие разрешимости этого уравнения имеет вид

$$(2.3) \quad \frac{\partial_1}{\partial t} n_\beta = n_{ij} D_\beta \left( \frac{\partial_0}{\partial y} \frac{\partial_1}{\partial y} \frac{n_\beta}{n_{ij}} + \frac{\partial_1}{\partial y} \frac{\partial_0}{\partial y} \frac{n_\beta}{n_{ij}} \right)$$

Преобразовав с помощью (2.3) неоднородную часть уравнения (2.2), можно показать, что

$$(2.4) \quad \begin{aligned} \varphi_{\beta\gamma} = & -C_\beta V_{\beta\gamma} \frac{\partial_2}{\partial y} \frac{n_\beta}{n_{ij}} - A_\beta V_{\beta\gamma} \frac{\partial_2 \ln T}{\partial y} - \sum_\gamma C_{\beta\gamma} V_{\beta\gamma} \frac{\partial_0}{\partial y} \frac{n_\gamma}{n_{ij}} - \\ & - C_{\beta ij} V_{\beta\gamma} \frac{d^2}{dy} \frac{n_i}{n_{ij}} - B_\beta V_{\beta x} V_{\beta\gamma} \frac{\partial_2 u_x}{\partial y} + \left[ Q_\beta^{(1)} \left( V_{\beta\gamma}^2 - \frac{V_\beta^2}{3} \right) + \right. \\ & \left. + Q_\beta^{(2)} \right] \left( \frac{\partial_0}{\partial y} \frac{\partial_1}{\partial y} \frac{n_\beta}{n_{ij}} + \frac{\partial_1}{\partial y} \frac{\partial_0}{\partial y} \frac{n_\beta}{n_{ij}} \right) - \\ & - S_\beta V_{\beta\gamma} \frac{\partial_0^3}{\partial y^3} \frac{n_\beta}{n_{ij}} + \frac{m_\beta}{kT} V_{\beta\gamma} u_\gamma, \quad C_{\beta ij} = -C_{\beta ji} \end{aligned}$$

Здесь  $A_\beta$ ,  $B_\beta$ ,  $C_{\beta ij}$  не зависят от  $n_\beta$ ;  $C_\beta$ ,  $Q_\beta^{(1)}$ ,  $Q_\beta^{(2)}$ ,  $S_\beta$  пропорциональны  $n_\beta^{-1}$ , а  $C_{\beta\gamma}$  зависят от  $n_\beta$  более сложным образом.

Помимо навье-стоксовских и уже встречавшихся барнеттовских членов, которые дают вклад в тепловой и диффузионный потоки вдоль оси  $y$ , а также в диагональные компоненты тензора касательных напряжений, в (2.4) входит и супербарнеттовский член  $S_\beta V_{\beta\gamma} \partial_0^3 (n_\beta/n_{ij})/\partial y^3$ , ответственный за вклад в тепловой и диффузионный потоки.

Функции  $Q_\beta^{(2)}$  определяются так же, как и выше, по отсутствию вклада в величину  $n_\beta$ .

Супербарнеттовские члены присутствуют и в следующем члене разложения функции распределения продуктов реакции  $f_i$  — в  $f_{i0\Phi_{i5}}$ , который удовлетворяет уравнению

$$(2.5) \quad \begin{aligned} V_{iy} \frac{\partial_0 f_{i0\Phi_{i4}}}{\partial y} + V_{iy} \frac{\partial_1 f_{i0\Phi_{i3}}}{\partial y} + V_{iy} \frac{\partial_2 f_{i0}}{\partial y} - V_{iy} \frac{\partial_0 f_{i0}}{\partial V_{ix}} \frac{\partial_4 u_x}{\partial y} + \\ + \frac{\partial_3 f_{i0}}{\partial t} + \frac{\partial_0 f_{i0\Phi_{i3}}}{\partial t} - \frac{\partial f_{i0}}{\partial V_{ix}} \frac{\partial_3 u_x}{\partial t} - J_i^R(f_0, f_0\Phi_1) - \\ - \sum_\gamma J_{i\gamma}^e(f_0, f_0\Phi_3) = \sum_j J_{ij}^e(f_0, f_0\Phi_3) \end{aligned}$$

Условия разрешимости уравнения (2.5) могут быть записаны следующим образом:

$$(2.6) \quad \begin{aligned} \frac{\partial_3 n_i}{\partial t} = & -n_i \frac{\partial_1 u_\gamma}{\partial y} + n_i D_i \left( \frac{\partial_0}{\partial y} \frac{\partial_3}{\partial y} \frac{n_i}{n_{ij}} + \frac{\partial_1}{\partial y} \frac{\partial_2}{\partial y} \frac{n_i}{n_{ij}} \right) + \\ & + \frac{n_i D_i T}{T} \left( \frac{\partial_0}{\partial y} \frac{\partial_3 T}{\partial y} + \frac{\partial_1}{\partial y} \frac{\partial_2 T}{\partial y} \right) + n_i \sum_\gamma D_{i\gamma} \left( \frac{\partial_0}{\partial y} \frac{\partial_1}{\partial y} \frac{n_\gamma}{n_{ij}} + \frac{\partial_1}{\partial y} \frac{\partial_0}{\partial y} \frac{n_\gamma}{n_{ij}} \right) \\ \rho_{ij} \frac{\partial_3 u_x}{\partial t} = & \mu_{ij} \left( \frac{\partial_0}{\partial y} \frac{\partial_3 u_x}{\partial y} + \frac{\partial_1}{\partial y} \frac{\partial_2 u_x}{\partial y} \right) \\ \frac{\partial_4}{\partial y} p_{ij} = & \frac{4}{3} \mu_{ij} \frac{\partial_0^2}{\partial y^2} u_\gamma - \frac{4}{45} \left( \sum_i m_i \int f_{i0} A A_i V_i^4 dV_i \frac{\partial_0^2}{\partial y^2} \frac{\partial_2 T}{\partial y} + \right. \\ & \left. + \sum_i m_i \int f_{i0} C C_i V_i^4 dV_i \frac{\partial_0^2}{\partial y^2} \frac{\partial_2}{\partial y} \frac{n_i}{n_{ij}} + \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + \sum_{\gamma} \sum_i m_i \int f_{i0} dd_{i\gamma} V_i^4 dV_i \frac{\partial_0^3 n_{\gamma}}{\partial y^3 n_{ij}} - \\
 & - \frac{1}{3} \sum_{\gamma} \sum_i m_i \int f_{i0} G d_{i\gamma} V_i^2 dV_i \frac{\partial_0^3 n_{\gamma}}{\partial y^3 n_{ij}} - \\
 & - \frac{n_{ij}}{3} \sum_{\gamma} \sum_i m_i \int f_{i0} V_i^2 \frac{\partial GR_i}{\partial n_{\gamma}} dV_i \frac{\partial_0 n_{\gamma}}{\partial y n_{ij}} - \\
 & - n_{ij} \sum_{\gamma} m_{\gamma} D_{\gamma}^2 \frac{\partial_0^3 n_{\gamma}}{\partial y^3 n_{ij}} - n_{ij} \sum_{\gamma} \sum_{\beta} m_{\beta} D_{\beta} \frac{\partial R_{\beta 0}}{\partial n_{\gamma}} \frac{\partial_0 n_{\gamma}}{\partial y n_{ij}} + \\
 & + \sum_i \int m_i V_{i\gamma} J_i^R(f_0, f_0 \Phi_1) dV_i + \sum_{\gamma} \sum_i \int m_i V_{i\gamma} J_{i\gamma}^e(f_0, f_0 \Phi_3) dV_i \\
 & \frac{3}{2} k n_{ij} \frac{\partial_3 T}{\partial t} = - n_{ij} k T \frac{\partial_1 u_{\gamma}}{\partial y} + \frac{\lambda_{ij}^T}{T} \left( \frac{\partial_0}{\partial y} \frac{\partial_3 T}{\partial y} + \frac{\partial_1}{\partial y} \frac{\partial_2 T}{\partial y} \right) + \\
 & + \lambda_{ij}^D \left( \frac{\partial_0}{\partial y} \frac{\partial_3}{\partial y} \frac{n_i}{n_{ij}} + \frac{\partial_1}{\partial y} \frac{\partial_2}{\partial y} \frac{n_i}{n_{ij}} \right) + \\
 & + \sum_{\gamma} \lambda_{i,j}^D \left( \frac{\partial_0}{\partial y} \frac{\partial_1}{\partial y} \frac{n_{\gamma}}{n_{ij}} + \frac{\partial_1}{\partial y} \frac{\partial_0}{\partial y} \frac{n_{\gamma}}{n_{ij}} \right) - \\
 & - \frac{3}{2} k T \sum_i \left[ n_i D_i \left( \frac{\partial_0}{\partial y} \frac{\partial_3}{\partial y} \frac{n_i}{n_{ij}} + \frac{\partial_1}{\partial y} \frac{\partial_2}{\partial y} \frac{n_i}{n_{ij}} \right) + \right. \\
 & \left. + \frac{n_i D_i^T}{T} \left( \frac{\partial_0}{\partial y} \frac{\partial_3 T}{\partial y} + \frac{\partial_1}{\partial y} \frac{\partial_2 T}{\partial y} \right) + n_i \sum_{\gamma} D_{i\gamma} \left( \frac{\partial_0}{\partial y} \frac{\partial_1}{\partial y} \frac{n_{\gamma}}{n_{ij}} + \frac{\partial_1}{\partial y} \frac{\partial_0}{\partial y} \frac{n_{\gamma}}{n_{ij}} \right) \right] + \\
 & + \sum_{\gamma} \sum_i \int \frac{m_i V_i^2}{2} J_{i\gamma}^e(f_0, f_0 \Phi_3) dV_i
 \end{aligned}$$

Поправки к уравнениям неразрывности, сохранения энергии и импульса по оси  $y$  в данном приближении можно получить, если воспользоваться соответствующими следствиями уравнения для  $\Phi_{\beta 3}$  (2.2), в частности соотношением (2.3). Поправка к уравнению неразрывности принимает вид

$$\partial_3 \rho_{ij} / \partial t + \partial_1 \rho_{\beta\gamma} / \partial t = - \rho_{ij} \partial_1 u_{\gamma} / \partial y$$

т. е. в стационарном случае  $\partial_1 u_{\gamma} / \partial y = 0$ . Поскольку имеют место равенства, которые можно установить с помощью уравнения (2.2)

$$\begin{aligned}
 (2.7) \quad & \sum_i \int m_i V_{i\gamma} J_i^R(f_0, f_0 \Phi_1) dV_i + \sum_{\gamma} \sum_i \int m_i V_{i\gamma} J_{i\gamma}^e(f_0, f_0 \Phi_3) dV_i = \\
 & = - \sum_{\beta} \int m_{\beta} V_{\beta\gamma} J_{\beta}^R(f_0, f_0 \Phi_1) dV_{\beta} - \sum_{\gamma} \sum_i \int m_{\gamma} V_{\gamma\gamma} J_{\gamma}^e(f_0, f_0 \Phi_3) dV_{\gamma} = \\
 & = - \frac{\partial_2}{\partial y} p_{\beta\gamma} - \frac{n_{ij}}{3} \sum_{\beta} \sum_{\gamma} m_{\beta} \int f_{\beta 0}^* V_{\beta}^2 \frac{\partial G_{\beta}}{\partial n_{\gamma}} dV_{\beta} \frac{\partial_0 n_{\gamma}}{\partial y n_{ij}} - \\
 & - \frac{4}{45} \sum_{\beta} m_{\beta} \int f_{\beta 0} Q_{\beta}^{(1)} V_{\beta}^4 dV_{\beta} \frac{\partial_0^3 n_{\beta}}{\partial y^3 n_{ij}} -
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & -\frac{1}{3} \sum_{\beta} m_{\beta} \int f_{\beta 0} Q_{\beta}^{(2)} V_{\beta}^2 dV_{\beta} \frac{\partial_0^3 n_{\beta}}{\partial y^3 n_{ij}} + \\
 & + n_{ij} \sum_{\gamma} m_{\gamma} D_{\gamma}^2 \frac{\partial_0^3 n_{\gamma}}{\partial y^3 n_{ij}} + n_{ij} \sum_{\gamma} \sum_{\beta} m_{\gamma} D_{\gamma} \frac{\partial R_{\gamma 0}}{\partial n_{\beta}} \frac{\partial_0 n_{\beta}}{\partial y n_{ij}} \\
 (2.8) \quad & \sum_{\gamma} \sum_i \int \frac{m_i V_i^2}{2} J_{i\gamma} e(f_0, f_0 \Phi_3) dV_i = - \sum_{\gamma} \sum_i \int \frac{m_{\gamma} V_{\gamma}^2}{2} J_{\gamma i} e(f_0, f_0 \Phi_3) dV_{\gamma} = \\
 & = \sum_{\beta} \lambda_{\beta}^D \left( \frac{\partial_0}{\partial y} \frac{\partial_1 n_{\beta}}{\partial y n_{ij}} + \frac{\partial_1}{\partial y} \frac{\partial_0 n_{\beta}}{\partial y n_{ij}} \right) - \\
 & - \frac{3}{2} kT n_{ij} \sum_{\beta} D_{\beta} \left( \frac{\partial_0}{\partial y} \frac{\partial_1 n_{\beta}}{\partial y n_{ij}} + \frac{\partial_1}{\partial y} \frac{\partial_0 n_{\beta}}{\partial y n_{ij}} \right)
 \end{aligned}$$

то, подставляя (2.7) и (2.8) в соответствующие равенства (2.6) и сокращая ряд членов, получим поправки к уравнениям сохранения энергии и импульса по координате  $y$ . Полученные соотношения представляют собой результат линеаризации уравнений, описывающих структуру области реакций в главном приближении, и, следовательно, не выходят за рамки уравнений Навье – Стокса и выписанных ранее уравнений для главного приближения к решению. Иными словами, погрешность решения, полученного с использованием системы уравнений главного приближения для структуры области реакций, превышает по порядку величины  $\epsilon^{1/2}$  (неучет структуры приводит в решении к ошибкам порядка  $\epsilon^{1/2}$  (см. [1]). Поправки в уравнениях возникают лишь в следующем приближении.

Выражение для пятого члена в разложении градиента давления по координате  $y$ , представляющего собой сумму  $\partial_i p_{ij} / \partial y$  и  $\partial_2 p_{\beta\gamma} / \partial y$ , соответствует упомянутому следующему приближению. Как и утверждалось выше, величина этого члена разложения  $\partial p / \partial y$  определяется в основном барнеттовскими слагаемыми (в стационарном случае только ими) в тензоре напряжений. Выход за рамки уравнений Навье – Стокса в этом приближении имеет место и в остальных уравнениях. Ранее уже получен включающий в себя супербарнеттовские слагаемые структурный вид функций  $\Phi_{\beta\gamma}$ , которые дают вклад в уравнения последнего из рассматриваемых здесь приближений к решению в области реакций. Супербарнеттовские члены входят и в функции  $\Phi_{i5}$ , структурный вид которых можно установить, преобразовав неоднородную часть уравнения (2.5) в соответствии с условиями разрешимости

$$\begin{aligned}
 \Phi_{i5} = & -A_i V_{iy} \frac{\partial_i \ln T}{\partial y} - B_i V_{ix} V_{iy} \frac{\partial_i u_x}{\partial y} - C_i V_{iy} \frac{\partial_i n_i}{\partial y n_{ij}} - \\
 & - \sum_{\gamma} d_{i\gamma} V_{iy} \frac{\partial_2 n_{\gamma}}{\partial y n_{ij}} - B_i \left( V_{iy}^2 - \frac{1}{3} V_i^2 \right) \frac{\partial_1 u_y}{\partial y} + \\
 & + \left[ BB_i \left( V_{iy}^2 - \frac{V_i^2}{5} \right) V_{ix} + GB_i V_{ix} \right] \left( \frac{\partial_0}{\partial y} \frac{\partial_3 u_x}{\partial y} + \frac{\partial_1}{\partial y} \frac{\partial_2 u_x}{\partial y} \right) + \\
 & + \left[ AA_i \left( V_{iy}^2 - \frac{V_i^2}{3} \right) + GA_i \right] \left( \frac{\partial_0}{\partial y} \frac{\partial_3 T}{\partial y} + \frac{\partial_1}{\partial y} \frac{\partial_2 T}{\partial y} \right) + \\
 & + \left[ CC_i \left( V_{iy}^2 - \frac{V_i^2}{3} \right) + GC_i \right] \left( \frac{\partial_0}{\partial y} \frac{\partial_3 n_i}{\partial y n_{ij}} + \frac{\partial_1}{\partial y} \frac{\partial_2 n_i}{\partial y n_{ij}} \right) + \\
 & + \sum_{\gamma} \left[ dd_{i\gamma} \left( V_{iy}^2 - \frac{V_i^2}{3} \right) + Gd_{i\gamma} \right] \left( \frac{\partial_0}{\partial y} \frac{\partial_1 n_{\gamma}}{\partial y n_{ij}} + \frac{\partial_1}{\partial y} \frac{\partial_0 n_{\gamma}}{\partial y n_{ij}} \right) + \\
 & + \left[ BB_i \left( V_{iy}^2 - \frac{3}{5} V_i^2 \right) V_{iy} + GB_i^* V_{iy} \right] \frac{\partial_0^2 u_y}{\partial y^2} +
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \left[ BBB_i \left( V_{iy}^2 - \frac{3}{7} V_i^2 \right) V_{ix} V_{iy} + GBB_i V_{ix} V_{iy} \right] \frac{\partial_0^2}{\partial y^2} \frac{\partial_2 u_x}{\partial y} + \\
& + \left[ AAA_i \left( V_{iy}^2 - \frac{3}{5} V_i^2 \right) V_{iy} + GAA_i V_{iy} \right] \frac{\partial_0^2}{\partial y^2} \frac{\partial_2 T}{\partial y} + \\
& + \left[ CCC_i \left( V_{iy}^2 - \frac{3}{5} V_i^2 \right) V_{iy} + GCC_i V_{iy} \right] \frac{\partial_0^2}{\partial y^2} \frac{\partial_2 n_i}{\partial y n_{ij}} + \\
& + \sum_{\gamma} \left[ ddd_{i\gamma} \left( V_{iy}^2 - \frac{3}{5} V_i^2 \right) V_{iy} + Gdd_{i\gamma} V_{iy} \right] \frac{\partial_0^3}{\partial y^3} \frac{n_{\gamma}}{n_{ij}} - \\
& - \Delta A_i V_{iy} \frac{\partial_2 \ln T}{\partial y} - \Delta C_i V_{iy} \frac{\partial_2 n_i}{\partial y n_{ij}} - \sum_{\gamma} \Delta dd_{i\gamma} V_{iy} \frac{\partial_0}{\partial y} \frac{n_{\gamma}}{n_{ij}} - \\
& - \Delta B_i V_{ix} V_{iy} \frac{\partial_2 u_x}{\partial y} + \sum_{\gamma} \left[ \Delta Q_{i\gamma}^{(1)} \left( V_{iy}^2 - \frac{1}{3} V_i^2 \right) + \Delta Q_{i\gamma}^{(2)} \right] \times \\
& \times \left( \frac{\partial_0}{\partial y} \frac{\partial_1}{\partial y} \frac{n_{\gamma}}{n_{ij}} + \frac{\partial_1}{\partial y} \frac{\partial_0}{\partial y} \frac{n_{\gamma}}{n_{ij}} \right)
\end{aligned}$$

Видно, что функция  $\Phi_{15}$  состоит из следующих слагаемых: линейризованных навье-стоксовских членов, входящих в  $\Phi_{13}$  и  $\Phi_{14}$ , линейризованных барнеттовских членов, дающих вклад в тензор напряжений и входящих в  $\Phi_{14}$ , супербарнеттовских слагаемых, дающих вклад в тензор напряжений, диффузионные и тепловой потоки по координате  $y$ , поправок к навье-стоксовским и некоторым барнеттовским членам, обусловленных линейризацией по отношению концентраций реагентов и продуктов реакции функций, определяющих коэффициенты переноса в смеси, где все концентрации имеют один порядок. Функции  $Gdd_{i\gamma}$ ,  $\Delta dd_{i\gamma}$ ,  $\Delta A_i$  и  $\Delta C_i$  выбираются таким образом, чтобы скомпенсировать вклад соответствующих членов  $\Phi_{13}$  в  $u_x$ , а  $\Delta Q_{i\gamma}^{(2)}$  выбираются так, чтобы скомпенсировать вклад  $\Phi_{13}$  в  $T$ . Остальные условия на  $\Phi_{15}$  накладываются как обычно.

Уравнения сохранения, содержащие вклады от  $\Phi_{15}$  и  $\Phi_{13}$  могут быть получены с помощью условий разрешимости уравнений для  $\Phi_{16}$  и  $\Phi_{14}$ . Однако из-за громоздкости эти соотношения здесь приводить не будем, а перечислим лишь старшие производные, входящие в эти уравнения, чтобы представить себе их структуру.

В уравнении сохранения числа частиц войдут производные  $\partial_0^3 u_y / \partial y^3$  (в стационарном случае отсутствуют),  $(\partial_0^3 / \partial y^3) \partial_2 T / \partial y$ ,  $(\partial_0^3 / \partial y^3) \partial_2 (n_i / n_{ij}) / \partial y$ ,  $\partial_0^4 (n_p / n_{ij}) / \partial y^4$ . Помимо этого в выражение для скорости реакции войдут члены, пропорциональные вторым производным от  $n_p$ , обусловленные скалярными членами в  $\Phi_{13}$ . В уравнение сохранения импульса по оси  $x$  войдет член, пропорциональный  $(\partial_0^3 / \partial y^3) \partial_2 u_x / \partial y$ , который равен нулю в стационарном случае. В уравнение сохранения импульса по оси  $y$  входят члены, пропорциональные  $\partial_0^2 u_y / \partial y^2$  (отсутствуют в стационарном случае),  $(\partial_0^2 / \partial y^2) \partial_2 T / \partial y$ ,  $(\partial_0^2 / \partial y^2) \partial_2 (n_i / n_{ij}) / \partial y$ ,  $\partial_0^3 (n_p / n_{ij}) / \partial y^3$ . И наконец, в уравнение сохранения энергии входят члены, пропорциональные  $\partial_0^3 u_y / \partial y^3$  (отсутствуют в стационарном случае),  $(\partial_0^3 / \partial y^3) \partial_2 T / \partial y$ ,  $(\partial_0^3 / \partial y^3) \partial_2 (n_i / n_{ij}) / \partial y$ ,  $\partial_0^4 (n_p / n_{ij}) / \partial y^4$ .

В первой части работы [1], посвященной анализу процесса горения неперемешанных топлив, было показано, что неучет структуры области реакций при решении задачи и замена этой области поверхностью реакций приводят в решении к ошибке порядка  $(\epsilon/\alpha)^{1/2}$  по сравнению с единицей.

Из анализа влияния барнеттовских и супербарнеттовских членов, полученных выше, можно показать, что пренебрежение ими приводит к погрешности в решении порядка  $\epsilon^{3/2}$  по сравнению с единицей для  $\alpha = O(1)$ . Для произвольных значений  $\alpha$  эта погрешность имеет порядок  $\epsilon^{3/2} \alpha^{1/2}$ . Для принятых выше условий ( $Y_{Ae} \sim Y_{Be} \sim 1$ ,  $M \tau^{1/2} = O(1)$ ) область реакций много тоньше слоя смешения, если только  $\alpha \gg \epsilon$ . Поэтому погрешность порядка  $\epsilon^{3/2} \alpha^{1/2}$  в этих случаях значительно превышает погрешность уравнений Прандтля, используемых для описания остальной части слоя смешения, которая как известно, имеет величину порядка  $\epsilon \sim Re^{-1}$ .

Это обстоятельство необходимо иметь в виду при построении решения задачи о горении предварительно неперемешанных топлив, происходящем при их ламинарном смешении, потому что равномерно пригодная во всем слое смешения система уравнений, обладающая точностью уравнений Прандтля, должна предусматривать учет полученных здесь барнеттовских и супербарнеттовских членов, существенных внутри области реакций.

С помощью условий разрешимости уравнений для  $\Phi_{16}$  и  $\Phi_{14}$  и соответствующих им поправок к газодинамическим уравнениям можно показать, что неучет в уравнениях структуры области реакций конвективных членов и членов, описывающих работу сил вязкости (в уравнении энергии), приводит в решении к погрешностям  $\sim (\varepsilon/\alpha)^{1/2}$ .

Поступила 18 X 1977

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Коган М. Н., Макашев Н. К. О модели «поверхности реакции» в теории горения перемешанных топлив, ч. 1. Асимптотический анализ течения. Изв. АН СССР, МЖГ, 1978, № 6.
2. Макашев Н. К. О решении уравнения Больцмана в задачах обтекания тел в режиме сплошной среды. Тр. ЦАГИ, 1976, вып. 1742.
3. Вальдман Л. Явления переноса в газах при среднем давлении. В сб. «Термодинамика газов». М., «Машиностроение», 1970.
4. Linan A. On the structure of laminar diffusion flames. Inst. Nac. Techn. Aeronaut. Techn. Rept № FM 63-2 (Clearinghouse Feder. Scient. and Techn. Inform., № AD-432822), Madrid, 1963.