

УДК 533.7:541.12

## О МЕТОДИКЕ ВЫВОДА ГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ ДЛЯ СЛОЖНЫХ СИСТЕМ

КОЛЕСНИЧЕНКО Е. Г.

Предложен общий алгоритм построения равномерно пригодного асимптотического решения кинетических уравнений в условиях, когда число медленно меняющихся макроскопических переменных больше числа сумматорных инвариантов оператора столкновений. Рассмотрен случай химически реагирующей газовой смеси и описан метод построения асимптотического решения для этого случая. В общем виде выписаны гидродинамические уравнения для реагирующих и релаксирующих газовых смесей и отмечено, что последовательный учет неравновесности процессов реакций и релаксации приводит к появлению в гидродинамических уравнениях ряда дополнительных членов, описывающих зависимость скоростей этих процессов от пространственных производных гидродинамических переменных.

1. В данной работе обсуждается методика вывода гидродинамических уравнений для сложных смесей многоатомных химически реагирующих газов из кинетических уравнений, которые в безразмерном виде можно записать как

$$(1.1) \quad \frac{\partial F_\alpha}{\partial t} + \mathbf{v}_\alpha \cdot \nabla F_\alpha = \frac{1}{\varepsilon} I_\alpha(F; \varepsilon)$$

Здесь  $F_\alpha(\mathbf{v}_\alpha, m_\alpha; \mathbf{r}, t)$  — нормированная на числовую плотность  $n_\alpha$  функция распределения компонента  $\alpha$ ,  $\alpha=1, \dots, \nu$ ,  $\mathbf{v}_\alpha$  — скорость центра масс частицы, а  $m_\alpha$  — набор квантовых чисел, задающих внутреннее состояние молекулы сорта  $\alpha$ ,  $\mathbf{r}$  — пространственная координата,  $\nabla \equiv \partial/\partial \mathbf{r}$ ,  $\varepsilon$  — число Кнудсена,  $I_\alpha$  — оператор столкновений для молекул сорта  $\alpha$ . Далее векторы и тензоры в трехмерном пространстве обозначаются полужирным шрифтом, точками между ними обозначается операция свертки, так что  $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$  — скалярное произведение векторов  $\mathbf{a}$  и  $\mathbf{b}$ ,  $\mathbf{a} : \mathbf{b}$  — свертка тензоров второго ранга  $\mathbf{a}$  и  $\mathbf{b}$ . В (1.1) учтено, что оператор  $I_\alpha$  в общем случае может зависеть от  $\varepsilon$ .

Предложенные к настоящему времени способы получения гидродинамических уравнений из уравнения (1) описаны в [1–8] и цитированной там литературе. Предлагаемый здесь подход является дальнейшим развитием идей, опубликованных в работах [3, 8, 9], и основывается на следующих положениях:

1. Метод вывода гидродинамических уравнений должен правильно учитывать тот факт, что различие в характерных временах свободного пробега и химических реакций чаще всего связано не с отношением сечений рассеяния, а с тем, что реакция происходит с большим сечением, но только при довольно редких столкновениях высокоэнергетических частиц.

2. Удовлетворительный метод вывода гидродинамических уравнений для химически реагирующих газов, правильно описывающий надежно установленные в химической физике экспериментальные результаты [10], должен уже в эйлеровском приближении приводить к неравновесным скоростям реакций, т. е. вычисленным по функциям распределения, отличным от максвелл-больцмановских.

3. Для корректного применения асимптотических методов при выводе гидродинамических уравнений для реагирующих газов необходимо, чтобы выбор последовательных приближений был согласован со способом введения малого параметра в кинетические уравнения.

4. В случае многоатомных и реагирующих газов набор гидродинамических переменных зависит от характера течения и не является однозначно определенным. Достаточно общий метод должен учитывать это обстоятельство, т. е. дать критерий выбора пригодных для описания данного течения гидродинамических переменных и сформулировать способ получения гидродинамических уравнений для произвольного набора этих переменных.

Наиболее подробно в настоящее время разработан подход, в котором гидродинамические уравнения для химически реагирующих газов выводятся путем применения метода Чемпена - Энского к уравнению (1) с  $I_{1\alpha}$ , записанным в виде  $I_{1\alpha} + \varepsilon I_{2\alpha}$ , где  $\varepsilon I_{2\alpha} = O(\varepsilon)$  - часть, учитывающая химические реакции [1, 2]. В эйлеровском приближении такой подход приводит к равновесным константам скоростей реакций и релаксационных процессов. В некоторых случаях это не позволяет удовлетворительно описать кинетику химических реакций, например не приводит к экспериментально наблюдаемому [10] переходу реакции диссоциации многоатомных молекул от мономолекулярного механизма при высоких давлениях к бимолекулярному при низких. Кроме того, конкретные расчеты показывают, что ряд последовательных приближений к скоростям реакций, вычисляемый таким способом, может расходиться.

Это объясняется тем, что при наличии достаточно высокой энергии активации реакции  $E_a$  скорость реакции определяется значениями функции распределения в области высоких энергий, в предельном случае - энергий порядка  $E_a$ . При отсутствии у сечения неупругих столкновений слабо зависящего от энергии малого стерического множителя, обусловленного, например, сильной зависимостью сечения реакции от взаимной ориентации сталкивающихся частиц,  $I_{1\alpha}$  в этой области может стать сравнимым с  $I_{2\alpha}$ , поэтому рассматривать здесь  $I_{2\alpha}$  как малое возмущение уже нельзя.

Таким образом, метод [1, 2] не удовлетворяет приведенным выше условиям 1 и 2. Опубликованный в [4] метод также не отвечает перечисленным в 1-4 требованиям. В работах [5-7] был предложен метод вывода гидродинамических уравнений для заселенностей колебательно-вращательных квантовых состояний молекул смеси. Для данного набора гидродинамических переменных он при определенных ограничениях позволяет решить задачи, поставленные в 1-2, однако не дает ответа на вопрос, сформулированный в пункте 4.

Для получения полного асимптотического решения кинетических уравнений нормальное решение нужно сростить с разложением решения в начальных и граничных слоях Кнудсена. Такой подход позволяет также определить правильные начальные и граничные условия для выводимых гидродинамических уравнений. В отличие от случая одноатомных газов, для реагирующих эта задача имеет большой практический интерес, поскольку определяемые при ее решении поправки к начальным концентрациям реагентов связаны с экспериментально наблюдаемой величиной - временем индукции химической реакции.

Ниже излагается алгоритм построения такого асимптотического разложения в предположении, что граничные слои Кнудсена отсутствуют.

Основная идея обсуждаемого здесь подхода заключается в том, что в условиях, когда число гидродинамических переменных превышает число сумматорных инвариантов оператора столкновений, для корректного построения асимптотического решения кинетических уравнений их следует преобразовать путем замены искоемых переменных к стандартному виду сингулярно возмущенной системы уравнений [11]. Смысл такой замены заключается в выделении уравнений для медленно меняющихся переменных. Различные варианты такого преобразования исследовались в [3, 8, 9]. Здесь рассматривается дальнейшее развитие такого подхода.

Макроскопические наблюдаемые величины определяются как средние от функции вида  $\psi_a(\mathbf{v}_a, m_a)$ . Для сокращения записи удобно, как и в

[8], ввести векторные обозначения:  $\psi(\mathbf{v}, m) \equiv \{\psi_\alpha(\mathbf{v}_\alpha, m_\alpha)\}$ ,  $\psi\eta$  — вектор с компонентами  $\psi_\alpha\eta_\alpha$

$$\langle \psi, \eta \rangle \equiv \sum_{\alpha=1}^{\nu} \sum_{m_\alpha} \int d\mathbf{v}_\alpha \psi_\alpha(\mathbf{v}_\alpha, m_\alpha) \eta_\alpha(\mathbf{v}_\alpha, m_\alpha)$$

Уравнение (1.1) в этих обозначениях запишется в виде

$$\frac{\partial F_i}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla F = \frac{1}{\varepsilon} I(F)$$

При заданном числе Кнудсена в набор гидродинамических переменных  $\Gamma_i = \langle \varphi_i, F \rangle$ ,  $i=1, \dots, K$ , будем включать макроскопические величины, соответствующие таким  $\varphi_i$ , которые для достаточно широкого класса функций  $F$  удовлетворяют условиям

$$(1.2) \quad \langle \varphi_i, I(F) \rangle \leq O(\varepsilon)$$

Здесь принимается, что  $\varphi_i$  не зависят от  $\mathbf{r}$  и  $t$ . В практических расчетах обычно используются функции  $\varphi_i'$ , являющиеся линейными комбинациями  $\varphi_i$  с коэффициентами от  $\Gamma$ . Легко видеть, что переход от выводимых ниже гидродинамических уравнений для  $\Gamma_i$  к уравнениям для  $\Gamma_i' = \langle \varphi_i', F \rangle$  сводится к обычной замене переменных  $\Gamma_i' = \Gamma_i'(\Gamma)$ . Поэтому для простоты дальнейшие рассуждения будут проводиться с использованием функций  $\varphi_i$ .

Во многих случаях выполнение свойства (1.2) связано с возможностью представления  $I$  в виде  $I_1 + I_2$ , причем  $|I_1| = O(1)$ ,  $\max |I_2| = O(\varepsilon)$  и гидродинамические переменные соответствуют сумматорным инвариантам  $I_1$ . Для проведения конкретных оценок здесь тоже будет использоваться такое представление оператора  $I$ , хотя для формального применения излагаемого метода оно и не требуется.

Один из возможных способов указанного выше преобразования заключается в замене переменных  $F = F_0 + \Phi$ , где  $F_0$  — набор произвольных функций, зависящих от  $K$  параметров и удовлетворяющих единственному условию  $\langle \varphi_i, F_0 \rangle = \Gamma_i$ . Таким образом, можно считать, что  $F_0 = F_0(\Gamma)$ , а на  $\Phi$  нужно наложить  $K$  дополнительных условий  $\langle \varphi_i, \Phi \rangle = 0$ . Кинетические уравнения (1.1) преобразуются тогда в систему уравнений для  $\Gamma_i$  и  $\Phi$ :

$$(1.3) \quad \frac{\partial \Gamma_i}{\partial t} = -\nabla \cdot \langle \mathbf{v} \varphi_i, (F_0 + \Phi) \rangle + \langle \varphi_i, I^\circ(F_0 + \Phi) \rangle$$

$$(1.4) \quad \varepsilon \frac{\partial \Phi}{\partial t} = -\varepsilon \mathbf{v} \cdot \nabla \Phi + J_\Psi(E_0 + \Phi) -$$

$$-\varepsilon \sum_{i=1}^K \frac{\partial F_0}{\partial \Gamma_i} [\mathbf{v} \cdot \nabla \Gamma_i - \nabla \cdot \langle \mathbf{v} \varphi_i, (F_0 + \Phi) \rangle], \quad \Psi = F_0$$

$$\langle \varphi_i, I^\circ(F_0 + \Phi) \rangle = \langle \varphi_i, I(F_0 + \Phi) \rangle / \varepsilon = O(1)$$

$$J_\Psi(F) = I(F) - \sum_{i=1}^K \frac{\partial \Psi}{\partial \Gamma_i} \langle \varphi_i, I(F) \rangle$$

Система уравнений (1.3) — (1.4) имеет стандартный вид сингулярно возмущенной системы и для построения формального асимптотического разложения ее решения можно применить какой-либо из известных методов. Так, например, применение метода работы [11] приводит к обобщению метода Гильберта, а метод двухмасштабных разложений [12] дает обоб-

щение метода Чепмена — Энского. Здесь будет рассмотрен другой вариант метода двухмасштабных разложений, объединяющий подход работы [11] с идеями метода Чепмена — Энского. Он близок к предложенному в [2, 13], но отличается от последнего способом сращивания разложения в начальном слое с нормальным решением.

Для сокращения записи обозначим правые части системы (1.3) — (1.4)  $g_i(\Gamma, \Phi)$  и  $f(\Gamma, \Phi)$  соответственно. Будем искать функцию  $\Phi$  и переменные  $\Gamma_i$  в виде  $\Phi = \Phi_1(\tau) + \Phi_2(t)$ ,  $\Gamma_i = \Gamma_{1i}(\tau) + \Gamma_{2i}(t)$ , где  $\tau = t/\varepsilon$ . Предположим, что быстро меняющиеся величины  $\Phi_1$  и  $\Gamma_{1i}$  представимы в виде рядов по степеням  $\varepsilon$ , а медленно меняющаяся часть  $\Phi_2$  в соответствии с методом Чепмена — Энского зависит от  $\tau$  и  $t$  только через зависимость от  $\Gamma_i$  и их пространственных производных. Таким образом

$$(1.5) \quad \Phi_1 = \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon^n \Phi_1^{(n)}(\tau), \quad \Gamma_{1i} = \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon^n \Gamma_{1i}^{(n)}(\tau)$$

$$(1.6) \quad \Phi_2 = \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon^n \Phi_2^{(n)}(\Gamma_2, \nabla \Gamma_2, \dots, \nabla^n \Gamma_2)$$

$$(1.7) \quad \frac{\partial \Gamma_{2i}}{\partial t} = \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon^n B_i^{(n)}(\Gamma_2, \nabla \Gamma_2, \dots, \nabla^{n+1} \Gamma_2)$$

Аналогично [11] уравнения (1.3), (1.4) представляются в виде

$$(1.8) \quad \frac{\partial \Gamma_{2i}}{\partial t} + \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial \Gamma_{2i}}{\partial \tau} = g_i(\Gamma_2(t), \Phi_2(t); \varepsilon) + \\ + \{g_i(\Gamma_2(\varepsilon\tau) + \Gamma_1(\tau), \Phi_2(\varepsilon\tau) + \Phi_1(\tau); \varepsilon) - g_i(\Gamma_2(\varepsilon\tau), \Phi_2(\varepsilon\tau); \varepsilon)\}$$

$$(1.9) \quad \varepsilon \frac{\partial \Phi_2}{\partial t} + \frac{\partial \Phi_1}{\partial \tau} = f(\Gamma_2(t), \Phi_2(t), \varepsilon) + \\ + \{f(\Gamma_2(\varepsilon\tau) + \Gamma_1(\tau), \Phi_2(\varepsilon\tau) + \Phi_1(\tau); \varepsilon) - f(\Gamma_2(\varepsilon\tau), \Phi_2(\varepsilon\tau); \varepsilon)\}$$

и отдельно приравниваются части, зависящие от  $t$  и от  $\tau$ . При этом члены в фигурных скобках раскладываются по явно фигурирующему в них  $\varepsilon$  в степенные ряды. Однако в отличие от [11] для построения разложения медленно меняющейся части используется процедура метода Чепмена — Энского, т. е. в уравнения

$$(1.10) \quad \frac{\partial \Gamma_{2i}}{\partial t} = g_i(\Gamma_2, \Phi_2; \varepsilon), \quad \varepsilon \frac{\partial \Phi_2}{\partial t} = f(\Gamma_2, \Phi_2; \varepsilon)$$

подставляются разложения (1.6) и (1.7). При этом производные  $\partial \Phi_2^{(n)} / \partial t$  в левой части (1.10) вычисляются по формуле

$$\frac{\partial \Phi_2^{(n)}}{\partial t} = \sum_{i=1}^k \sum_{l=0}^n \frac{\partial \Phi_2^{(n)}}{\partial \nabla^l \Gamma_{2i}} \nabla^l \sum_{q=0}^{\infty} \varepsilon^q B_i^{(q)}$$

Приравнивая члены одного порядка по  $\varepsilon$ , последовательно определяем  $\Phi_2^{(n)}$  и  $B_i^{(n)}$ .

Уравнения для  $\Phi_2^{(m)}$  имеют вид

$$(1.11) \quad J_{\Psi}(F_0 + \Phi_2^{(0)}) = 0, \quad \Psi = F_0$$

$$(1.12) \quad J_{\Psi}^{(1)}(F_0 + \Phi_2^{(0)})\Phi_2^{(n)} = \chi^{(n)}, \quad \Psi = F_0 + \Phi_2^{(0)}$$

Здесь  $\chi^{(n)}$  — функции, определяемые по предыдущим приближениям, а  $J_{\Psi}^{(1)}(F_0 + \Phi_2^{(0)})$  — линейный оператор, получающийся линеаризацией  $J_{\Psi}(F)$  около функции  $F_0 + \Phi_2^{(0)}$ . Нетрудно убедиться, что по самому способу построения  $\langle \varphi_i, \chi^{(n)} \rangle = 0$ . Ортогональность  $\varphi_i$  левой части (1.12) следует из цепочки выкладок

$$\begin{aligned} \langle \varphi_i, J_{\Psi}(Y) \rangle &= \langle \varphi_i, I(Y) \rangle - \sum_{j=1}^{\kappa} \left\langle \varphi_i, \frac{\partial \Psi}{\partial \Gamma_j} \right\rangle \times \\ &\times \langle \varphi_j, I(Y) \rangle = \langle \varphi_i, I(Y) \rangle - \sum_{j=1}^{\kappa} \langle \varphi_j, I(Y) \rangle \times \\ &\times \frac{\partial}{\partial \Gamma_j} \langle \varphi_i, \Psi \rangle = 0, \quad \Psi = F_0 + \Phi_2^{(0)} \end{aligned}$$

Таким образом, условия разрешимости (1.12) выполнены и, если числа левых и правых нулевых собственных функций оператора  $J_{\Psi}^{(1)}(F_0 + \Phi_2^{(0)})$  совпадают, на  $\Phi_2^{(n)}$  можно наложить  $K$  дополнительных условий  $\langle \varphi_i, \Phi_2^{(n)} \rangle = 0$ .

Для определения  $\Phi_1^{(n)}$  и  $\Gamma_{1i}^{(n)}$  члены в фигурных скобках в правой части (1.8) и (1.9) раскладываются по  $\varepsilon$  так же, как и в [2]. Отличие от метода [2] связано только со способом разложения по  $\varepsilon \Phi_2(\varepsilon \tau)$  и  $\Gamma_{2i}(\varepsilon \tau)$ .

Заметим, что  $\Gamma_{2i}(\varepsilon \tau)$  зависят от  $\varepsilon$  неявно, во-первых, как решение уравнения (1.7), во-вторых, вследствие того, что для получения равномерно пригодного приближения в начальные условия  $\Gamma_{2i}(0)$  нужно вводить зависящие от  $\varepsilon$  поправки, т. е.  $\Gamma_{2i}(0)$  представляется в виде ряда по  $\varepsilon$ . Поэтому для получения разложения  $\Gamma_{2i}(\varepsilon \tau)$  по  $\varepsilon$  сначала раскладываем их в ряд Тейлора по  $\varepsilon \tau$ , а производные  $(1/n!) \partial^n \Gamma_{2i}(0) / \partial t^n$ , являющиеся коэффициентами этого разложения, вычисляем с помощью (1.7), например

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \Gamma_{2i}(0)}{\partial t^2} &= \sum_{j=1}^{\kappa} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} \varepsilon^{n+l} \left( \frac{\partial B_i^{(n)}}{\partial \Gamma_j} B_j^{(l)} + \right. \\ &\left. + \frac{\partial B_i^{(n)}}{\partial \nabla \Gamma_j} \nabla B_j^{(l)} + \dots + \frac{\partial B_i^{(n)}}{\partial \nabla^{n+1} \Gamma_j} \nabla^{n+1} B_j^{(l)} \right)_{t=0} \end{aligned}$$

В первых двух порядках получаем  $\Gamma_{2i}(\varepsilon \tau) = \Gamma_{2i}^{(0)}(0) + \varepsilon [\Gamma_{2i}^{(1)}(0) + B_i^{(0)}(\Gamma_{2i}^{(0)}(0))\tau] + O(\varepsilon^2)$ . Для разложения  $\Phi_2(\varepsilon \tau)$  в  $\Phi_2^{(n)}(\Gamma_{2i}(\varepsilon \tau), \dots, \nabla^{n+1} \Gamma_{2i}(\varepsilon \tau))$  подставляются разложения  $\Gamma_{2i}(\varepsilon \tau)$  по  $\varepsilon$  и результат раскладывается по  $\varepsilon$ . Дальнейший ход рассуждений совпадает с используемым в [11]. Начальные условия для  $\Gamma_{1i}^{(n)}(0)$  выбираются из требования обращения  $\Gamma_{1i}^{(n)}(\tau)$  в 0 при  $\tau \rightarrow \infty$ , а  $\Gamma_{2i}^{(n)}(0) = -\Gamma_{1i}^{(n)}(0)$  при  $n > 0$ ;

$\Gamma_1^{(0)}(0) = 0$ ,  $\Gamma_2^{(0)}(0) = \Gamma(0)$ . Таким образом, гидродинамические уравнения  $Q$ -го приближения имеют вид

$$\frac{\partial \Gamma_{2i}}{\partial t} = \sum_{n=0}^q \varepsilon^n B_i^{(n)}(\Gamma_2, \nabla \Gamma_2, \dots, \nabla^{n+1} \Gamma_2),$$

$$\Gamma_{2i}(0) = \sum_{n=0}^{q-1} \varepsilon^n \Gamma_{2i}^{(n)}(0)$$

Для математического обоснования изложенного алгоритма на вид уравнений (1.3), (1.4) приходится накладывать ряд ограничений. Их физический смысл сводится к требованию существования асимптотически устойчивого квазистационарного состояния в системе при заданных внешних ограничениях, которые в данном случае связаны с выбором набора гидродинамических переменных. В общем случае, например для открытых систем, эти условия выполняются не всегда. Если они выполнены и для уравнения (1.1) справедлива  $H$ -теорема, то при построении описания системы в гидродинамическом режиме возможны существенные упрощения.

2. Рассмотрим химически реагирующую газовую смесь. Оператор  $I_\alpha$  в данном случае может быть представлен в виде [14]

$$I_\alpha = \sum'_{c, c'} \sum_{\{m_c\} \{m_{c'}\}} \int \prod_{i \in c} dp_i \prod_{j \in c'} dp_j W(\mathbf{p}_\alpha, m_\alpha, \{\mathbf{p}_c, m_c\} | \{\mathbf{p}_{c'}, m_{c'}\}) \times$$

$$\times \left[ \prod_{j \in c'} \frac{F_j(\mathbf{p}_j, m_j)}{s_j(m_j)} - \frac{F_\alpha(\mathbf{p}_\alpha, m_\alpha)}{s_\alpha(m_\alpha)} \prod_{i \in c} \frac{F_i(\mathbf{p}_i, m_i)}{s_i(m_i)} \right]$$

Штрих у суммы по каналам рассеяния  $c$  и  $c'$  означает, что число частиц, участвующих в столкновении, либо в конечном  $c'$ , либо в начальном  $c$ -канале не превышает 2. Индексы  $i$  и  $j$  пробегают номера компонентов смеси, молекулы которых принимают участие в данном процессе столкновения,  $\mathbf{p}_\alpha \equiv M_\alpha \mathbf{v}_\alpha$  — импульс центра масс молекулы сорта  $\alpha$ ,  $\{\mathbf{p}_c, m_c\} \equiv \{\mathbf{p}_\beta, m_\beta, \mathbf{p}_\gamma, m_\gamma, \dots, \mathbf{p}_\nu, m_\nu\}$ ,  $\beta, \gamma, \dots, \nu \in c$ ,  $s_\alpha(m_\alpha)$  — статистический вес квантового состояния  $m_\alpha$  молекулы сорта  $\alpha$ ,  $W(\mathbf{p}_\alpha, m_\alpha, \{\mathbf{p}_c, m_c\} | \{\mathbf{p}_{c'}, m_{c'}\}) = W(\{\mathbf{p}_{c'}, m_{c'}\} | \{\mathbf{p}_\alpha, m_\alpha\} \{\mathbf{p}_c, m_c\})$  — вероятность перехода, выражающаяся либо через соответствующее сечение рассеяния, либо через матрицу времен жизни метастабильных состояний.

Уравнение баланса энтропии смеси  $S$  имеет вид

$$(2.1) \quad \frac{\partial S}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{j}_S + \sigma_S, \quad S \equiv -k \langle F, \ln F(se)^{-1} \rangle$$

$$\mathbf{j}_S = -k \langle \mathbf{v} F, \ln F s^{-1} \rangle$$

$$\sigma_S = \frac{k}{\varepsilon} \sum'_{c, c'} \sum_{\{m_c\} \{m_{c'}\}} \int \prod_{i \in c} dp_i \prod_{j \in c'} dp_j \times$$

(2.2)

$$\times W(\{\mathbf{p}_c, m_c\} | \{\mathbf{p}_{c'}, m_{c'}\}) \ln \frac{\prod_{j \in c'} F_j / s_j}{\prod_{i \in c} F_i / s_i} \left[ \prod_{j \in c'} \frac{F_j}{s_j} - \prod_{i \in c} \frac{F_i}{s_i} \right] \geq 0$$

Из (2.1) видно, что в отсутствие пространственных слоев Кнудсена за начальный период времени  $T=O(\varepsilon)$  в системе устанавливается такой режим, что локальное производство энтропии  $\sigma_s$  становится величиной порядка 1. Представим  $F_\alpha$  в этом режиме в виде  $F_\alpha = s_\alpha \exp(-\gamma_1 \Phi_{1\alpha} - \gamma_2 \Phi_{2\alpha} - \dots - \gamma_k \Phi_{k\alpha} + \zeta_\alpha)$ . Подставляя их в (2.2) и используя симметрию функций  $W$ , находим, что

$$\sigma_s = -k \sum_{i=1}^k \gamma_i \frac{1}{\varepsilon} \langle \varphi_i, I(F) \rangle + \frac{k}{\varepsilon} \langle \zeta, I(F) \rangle = O(1)$$

Сумма по  $i$  при  $\gamma_i = O(1)$  по определению гидродинамических переменных имеет порядок 1. Поскольку, по предположению, других функций, линейно-независимых от  $\varphi_i$ , для которых выполняется свойство (1.2), не существует, можно сделать вывод, что  $\zeta_\alpha = O(\varepsilon)$ . Таким образом, в данном случае в гидродинамическом режиме решение можно искать в виде  $F_\alpha = s_\alpha \exp(-\gamma_1 \Phi_{1\alpha} - \dots - \gamma_k \Phi_{k\alpha}) + \varepsilon \Phi_\alpha \equiv F_\alpha^{(0)} + \varepsilon \Phi_\alpha$ .

Можно показать, что  $F_\alpha^{(0)}$  совпадает с функцией распределения, максимизирующей энтропию системы при заданном наборе гидродинамических переменных  $\Gamma_i$ ,  $\gamma_i = \gamma_i(\Gamma)$ . По существу, утверждается, что решение уравнения  $J_{F^{(0)}}(F^{(0)} + \Phi^{(0)}) = 0$  имеет порядок  $\varepsilon$ . Действительно, при  $\Phi = \Phi^{(0)}$   $\sigma_s = O(\varepsilon)$  и, следовательно,  $\Phi^{(0)} = O(\varepsilon)$ .

Для использования изложенного выше алгоритма его нужно модифицировать следующим образом. Пусть  $F_0$  является решением уравнения  $J_{F^{(0)}}(F_0) = 0$ . Согласно сказанному выше,  $F_0 = F^{(0)} + \varepsilon \Delta$ . Представим решение уравнения (1.1) в виде  $F = F^{(0)}(\Gamma) + \varepsilon \Phi_2(t) + \Phi_1(\tau)$ , а уравнения для  $\Gamma_i = \Gamma_{2i}(t) + \Gamma_{1i}(\tau)$  и  $\Phi = \Phi_1(\tau) + \varepsilon \Phi_2(t)$  запишем как

$$\begin{aligned} \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial \Gamma_{1i}}{\partial \tau} + \frac{\partial \Gamma_{2i}}{\partial t} &= -\nabla \cdot \langle \mathbf{v} \varphi_i, (F_2^{(0)} + \varepsilon \Phi_2) \rangle + \\ &+ \langle \varphi_i, I^\circ(F_2^{(0)} + \varepsilon \Phi_2) \rangle + \{ -\nabla \cdot \langle \mathbf{v} \varphi_i, [F^{(0)} + \Phi_1 - F_2^{(0)}] \rangle + \\ &+ \langle \varphi_i, I^\circ(F_0 - \varepsilon \Delta + \Phi_1 + \varepsilon \Phi_2) \rangle - \langle \varphi_i, I^\circ(F_{02} - \varepsilon \Delta_2 + \varepsilon \Phi_2) \rangle \} \\ \frac{\partial \Phi_1}{\partial \tau} + \varepsilon^2 \frac{\partial \Phi_2}{\partial t} &= J_{\Psi}(F_2^{(0)} + \varepsilon \Phi_2) - \\ - \varepsilon \sum_{i=1}^k \frac{\partial F_2^{(0)}}{\partial \Gamma_{2i}} [ \mathbf{v} \cdot \nabla \Gamma_{2i} - \nabla \cdot \langle \mathbf{v} \varphi_i, (F_2^{(0)} + \varepsilon \Phi_2) \rangle ] + \\ &+ \left\{ J_{\chi}(F_0 - \varepsilon \Delta + \Phi_1 + \varepsilon \Phi_2) - J_{\Psi}(F_{02} - \varepsilon \Delta_2 + \varepsilon \Phi_2) - \right. \\ - \varepsilon \sum_{i=1}^k \frac{\partial F^{(0)}}{\partial \Gamma_i} [ \mathbf{v} \cdot \nabla (\Gamma_{1i} + \Gamma_{2i}) - \nabla \cdot \langle \mathbf{v} \varphi_i, (F^{(0)} + \Phi_1 + \varepsilon \Phi_2) \rangle ] + \\ &\left. + \varepsilon \sum_{i=1}^k \frac{\partial F_2^{(0)}}{\partial \Gamma} [ \mathbf{v} \cdot \nabla \Gamma_{2i} - \nabla \cdot \langle \mathbf{v} \varphi_i, (F_2^{(0)} + \varepsilon \Phi_2) \rangle ] \right\}, \quad \Psi = F_2^{(0)}, \quad \chi = F^{(0)}. \end{aligned}$$

Здесь  $\langle \varphi_i, I^\circ \rangle = \langle \varphi_i, I \rangle / \varepsilon = O(1)$ , функции  $F^{(0)}$ ,  $F_0$  и  $\Delta$  без индекса зависят от  $\Gamma_1 + \Gamma_2$ , а с индексом 2 — от  $\Gamma_2$ . Аргумент  $t$  у членов в фигурных скобках заменяется на  $\varepsilon t$ . Дальнейший ход действия полностью совпадает с изложенным выше. Модификация, заключающаяся во введении в фи-

гурные скобки функций  $F_0$ , приводит к тому, что при наличии устойчивого квазистационарного состояния все  $\Phi_1^{(n)}(\tau)$  стремятся к 0 при  $\tau \rightarrow \infty$ , а все уравнения для  $\Phi_2^{(n)}$ , начиная с  $n=0$ , являются линейными интегральными уравнениями вида  $J_{\Psi}^{(1)}(F_2^{(0)})\Phi_2^{(n)} = \chi^{(n)}$ ,  $\Psi = F_2^{(0)}$ . Как уже указывалось, изложенный метод позволяет определить и поправки к начальным значениям для  $\Gamma_{2i}(0)$ .

Гидродинамические уравнения нулевого и первого приближений можно записать в более конкретном виде, если учесть тензорную размерность гидродинамических переменных. Примем, что система характеризуется одной векторной переменной, соответствующей плотности импульса смеси или среднemasсовой скорости  $\mathbf{u}$ , плотностью внутренней энергии смеси  $E$  и набором скалярных переменных  $\Gamma_i$ . Определим соответствующие  $\varphi$  формулами

$$\varphi_{\mathbf{u}} = \left\{ \frac{M_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha}}{\rho} \right\}, \quad \varphi_E = \{ (M_{\alpha} c_{\alpha}^2 / 2 + e_{\alpha}(m_{\alpha})) / \rho \}, \quad \varphi_{\Gamma_i} = \{ \varphi_{\alpha i} \}$$

Здесь  $\rho$  — массовая плотность смеси,  $M_{\alpha}$  — молекулярный вес компонента  $\alpha$ ,  $e_{\alpha}(m_{\alpha})$  — внутренняя энергия молекулы сорта  $\alpha$ ,  $\mathbf{c}_{\alpha} = \mathbf{v}_{\alpha} - \mathbf{u}$ . Тогда можно показать, что

$$\begin{aligned} \Phi_{\alpha}^{(0)} &= \Phi_{\alpha 1}^{(0)} + \Phi_{\alpha 2}^{(0)} \nabla \cdot \mathbf{u} + \Phi_{\alpha 3}^{(0)} \mathbf{c}_{\alpha} \cdot \nabla E + \\ &+ \sum_i \Phi_{\alpha i}^{(0)} \mathbf{c}_{\alpha} \cdot \nabla \Gamma_i + \Phi_{\alpha 4}^{(0)} \left( \mathbf{c}_{\alpha} \mathbf{c}_{\alpha} - \frac{1}{3} \mathbf{c}_{\alpha}^2 \right) : \nabla \mathbf{u} \end{aligned}$$

Уравнения нулевого приближения приобретают при этом вид

$$(2.3) \quad \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} + \frac{1}{\rho} \nabla p = 0, \quad p = \frac{1}{3} \langle M c^2, F^{(0)} \rangle$$

$$(2.4) \quad \frac{\partial \Gamma_i}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{u} \Gamma_i = R_i, \quad R_i = \langle \varphi_i, I^{\circ}(F^{(0)}) \rangle + \langle \varphi_i, I^{(1)}(F^{(0)}) \Phi^{(0)} \rangle$$

$$(2.5) \quad \frac{\partial E}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla E + \frac{1}{\rho} p \nabla \cdot \mathbf{u} = 0$$

где  $I^{(1)}(F^{(0)})$  — линеаризованный оператор столкновений  $I$ . Ненулевой вклад в  $R_i$  дает только скалярная часть  $\Phi^{(0)}$ , поэтому

$$R_i = R_i^{(0)} + R_i^{(1)} + \nabla \cdot \mathbf{u} R_i^{(2)}$$

$$R_i^{(0)} = \langle \varphi_i, I^{\circ}(F^{(0)}) \rangle, \quad R_i^{(1)} = \langle \varphi_i, I^{(1)}(F^{(0)}) \Phi_1^{(0)} \rangle$$

$$R_i^{(2)} = \langle \varphi_i, I^{(1)}(F^{(0)}) \Phi_2^{(0)} \rangle$$

Левая часть уравнений (2.3)–(2.5) имеет вид обычной системы уравнений эйлеровского приближения, однако выражения для скоростей реакций и релаксационных процессов отличаются в двух важных отношениях. Они, во-первых, учитывают возмущения функций распределения за счет химических реакций и релаксационных процессов, во-вторых, содержат часть, пропорциональную  $\nabla \cdot \mathbf{u}$ . На наличие последней указывает как непосредственное применение термодинамики необратимых процессов [15], так и вывод уравнений гидродинамики методом Грэда [16]. К аналогичному результату приводит и применение метода, описанного в [4, 2], однако эта поправка появляется при этом только в следующем, навье-стоксовском приближении. Подробные оценки этого члена [17] по-

казывают, что в некоторых случаях он может иметь тот же порядок величины, что и остальные члены уравнений (2.4), и должен, вообще говоря, учитываться уже в нулевом приближении.

В первом приближении гидродинамические уравнения приобретают вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} &= -\frac{1}{\rho} \nabla (p + p_2 - \kappa \nabla \cdot \mathbf{u}) - \frac{\eta}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{T} \\ \frac{\partial E}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla E + \frac{1}{\rho} (p + p_2 - \kappa \nabla \cdot \mathbf{u}) \nabla \cdot \mathbf{u} + \frac{\eta}{\rho} \mathbf{T} : \nabla \mathbf{u} + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{q}_E &= 0 \\ \frac{\partial \Gamma_i}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{u} \Gamma_i + \nabla \cdot \mathbf{q}_i &= R_i, \quad T_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial r_j} + \frac{\partial u_j}{\partial r_i} \right) - \frac{\delta_{ij}}{3} \nabla \cdot \mathbf{u} \end{aligned}$$

Здесь  $p_r$  — релаксационное давление [1],  $\eta$  и  $\kappa$  — коэффициенты сдвиговой и объемной вязкости, а потоки  $\mathbf{q}_E$  и  $\mathbf{q}_i$  и скорости физико-химических процессов  $R_i$  в общем случае записываются как

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_E &= \sum_i L_{Ei} \nabla \Gamma_i + L_{EE} \nabla E \\ \mathbf{q}_i &= \sum_j L_{ij} \nabla \Gamma_j + L_{iE} \nabla E \\ R_i &= R_i^{(0)} + R_i^{(1)} \nabla \cdot \mathbf{u} + R_i^{(2)} (\nabla \cdot \mathbf{u})^2 + R_i^{(3)} \mathbf{T} : \mathbf{T} + \\ &+ \sum_j R_{i,jE}^{(4)} \nabla \Gamma_j \cdot \nabla E + \sum_{j,k} R_{i,jk}^{(5)} \nabla \Gamma_j \cdot \nabla \Gamma_k + \\ &+ \sum_j R_{i,j}^{(6)} \nabla^2 \Gamma_j + R_i^{(7)} \nabla^2 E \end{aligned}$$

Таким образом, в отличие от результатов работы [18] структура получающихся гидродинамических уравнений, как уже указывалось в [8], отличается от общепринятой системы уравнений Навье — Стокса. В скоростях химических и релаксационных процессов появляются дополнительные слагаемые, зависящие от пространственных производных гидродинамических величин. Оценки этих членов показывают, что в некоторых случаях они могут быть сравнимы по величине с членами, содержащими коэффициенты переноса  $L$ . Последние вычисляются с помощью полного оператора столкновений и, следовательно, учитывают влияние химических реакций.

Физический смысл этих поправочных членов в первом приближении можно объяснить тем, что ввиду сильной зависимости скоростей химических и релаксационных процессов от температуры поступательных и внутренних степеней свободы даже малые отклонения этих величин от равновесных, обусловленные газодинамическими процессами и пропорциональные пространственным производным гидродинамических величин, приводят к конечным изменениям указанных скоростей.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Коган М. Н. Динамика разреженного газа. М.: Наука, 1967, 440 с.
2. Валландер С. В., Нагнибеда Е. А., Рыдалевская М. А. Некоторые вопросы кинетической теории химически реагирующей смеси газов. Л.: Изд-во Ленингр. ун-та, 1977. 280 с.

3. Колесниченко Е. Г., Гефтер В. М. О применении метода Энского – Чепмена для вывода гидродинамических уравнений для химически реагирующих газов. – Теплофизика высоких температур, 1974, т. 12, № 6, с. 1193.
4. Галкин В. С., Коган М. Н., Макашев Н. К. Обобщенный метод Чепмена – Энского. Ч. 1. Уравнения неравновесной газовой динамики. – Уч. зап. ЦАГИ, 1974, 5, № 5, с. 66.
5. Мацук В. А., Рыков В. А. О методе Чепмена – Энского для смеси газов. – Докл. АН СССР, 1977, т. 233, № 1, с. 49.
6. Мацук В. А., Рыков В. А. Распространение метода Чепмена – Энского на смеси реагирующих газов. – Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 1978, т. 18, № 1, с. 167.
7. Мацук В. А. О методе Чепмена – Энского для химически реагирующей газовой смеси с учетом внутренних степеней свободы. – Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 1978, т. 18, № 4, с. 1043.
8. Колесниченко Е. Г. Вывод гидродинамических уравнений для многоатомных и химически реагирующих газов. – Докл. АН СССР, 1978, т. 240, № 1, с. 40.
9. Колесниченко Е. Г. О применении метода квазистационарного состояния для интегрирования кинетических уравнений. – Теплофизика высоких температур, 1973, т. 11, № 1, с. 46.
10. Кондратьев В. Н., Никитин Е. Е. Кинетика и механизм газофазных реакций. М.: Наука, 1974. 558 с.
11. Васильева А. Б., Бугузов В. Ф. Асимптотические разложения решений сингулярно возмущенных уравнений. М.: Наука, 1973, 272 с.
12. Струминский В. В. Об одном методе решения кинетического уравнения Больцмана. – Докл. АН СССР, 1964, т. 158, № 2, с. 298.
13. Нагнибеда Е. А. О модификации метода Энского – Чепмена для смеси реагирующих газов с учетом быстрых и медленных процессов. – Вестн. Ленингр. ун-та, 1973, № 7, матем., мех., астроном., вып. 2, с. 109.
14. Колесниченко Е. Г. О формулировке кинетических уравнений для химически реагирующих газов. – Теплофизика высоких температур, 1980, т. 18, № 1.
15. Groot S. R. de, Mazur P. Nonequilibrium thermodynamics. Amsterdam, N. – Holland, publ., 1962. 510 p.
16. Жданов В. М., Скачков П. П. Уравнения переноса в химически реагирующих неоднородных газах. – Изв. АН СССР. МЖГ, 1972, № 3, с. 124.
17. Колесниченко Е. Г., Лосев С. А. Кинетика релаксационных процессов в движущихся средах. – В кн.: Химия плазмы. Вып. 6. М.: Атомиздат, 1979, с. 209.
18. Коган М. Н., Макашев Н. К. О построении уравнений газодинамики для многоатомных газов с произвольным отношением скоростей упругих и неупругих процессов. – Изв. АН СССР. МЖГ, 1978, № 2, с. 57.

Москва

Поступила в редакцию  
9.IV.1979