ПМТФ, № 4, 1973

УДК 541.124 : 532.5

ОБ ОДНОМ ТОЧНОМ РЕШЕНИИ УРАВНЕНИЙ НАВЬЕ — СТОКСА ДЛЯ ХИМИЧЕСКИ РЕАГИРУЮЩЕЙ СМЕСИ ГАЗОВ

В. А. Кронрод, В. В. Щенников

(Москва)

В работе приводится точное решение уравнений Навье — Стокса, описывающих течение вязкой, теплопроводной, химически реагирующей смеси газов в плоском расширяющемся канале. Условиями существования точного решения типа источника являются —эквимолекулярность химических реакций (в равновесной смеси газов), второй порядок прямых и обратных химических реакций (в неравновесной смеси газов).

Получены численные результаты для случая течения четырехкомпонентной равновесной смеси газов в плоском сопле при различных числах M и Re.

1. Существование точного решения уравнений Навье — Стокса, описывающих внутренние течения вязкого сжимаемого газа, впервые было установлено в работе [1]. Найденное в [1] точное решение соответствует течению газа в коническом сопле со специальным законом тепло- и массоотвода. В [2] построено обобщение решения Гамеля на случай течения вязкого сжимаемого газа. В работе [3] построен класс точных решений уравнений Навье — Стокса, включающий в себя частными случаями результаты [1, 2].

Подход, изложенный в [3], позволяет обобщить результаты [3] на случай течения химически реагирующей смеси газов.

Рассмотрим двумерные течения m-компонентной химически реагирующей смеси газов, состоящей из ν-химических элементов.

Система уравнений, описывающая указанное течение, может быть представлена в следующей векторной форме:

уравнения движения

$$\rho\,(\mathbf{V}\cdot\nabla)\,\mathbf{V} = -\nabla p + {}^1/_3\,\nabla\,(\mu\nabla\,\mathbf{V}) + \mu\,\Delta\,\mathbf{V} + \nabla\,(\nabla\mu\cdot\mathbf{V}) - \\ -\nabla\times(\nabla\mu\times\mathbf{V}) - \mathbf{V}\,\Delta\mu$$

уравнение неразрывности

$$\nabla\,(\rho\mathbf{V}) = 0$$

уравнение сохранения энергии

$$\rho\mathbf{V}\cdot\nabla\sum_{\alpha=1}^{m} c_\alpha h_\alpha - (\mathbf{V}\cdot\nabla)\,p = \nabla\,(\lambda\nabla T) - {}^2/_3\mu\,(\nabla\mathbf{V})^2 + \mu_\Delta\,(\mathbf{V})^2 -$$

$$-2\mu\mathbf{V}\cdot\nabla\,(\nabla\mathbf{V}) + 2\mu\Delta\mathbf{V}\times(\nabla\times\mathbf{V}) - \mu\,(\nabla\times\mathbf{V})^2 - \sum_{\alpha=1}^{m}\Delta\,(\mathbf{J}_\alpha h_\alpha)$$

уравнения сохранения химических элементов

$$\sum_{\alpha=1}^{m} n_{\tau\alpha}\nabla\,(\mu c_\alpha\mathbf{V} + \mathbf{J}_\alpha) = 0 \qquad (\tau = 1, 2, \ldots, \nu-1)$$

$$\sum_{\alpha=1}^{m} c_\alpha = 1$$

уравнения химического равновесия (в случае равновесной смеси)

$$K_{p\beta} = p^a \prod_{\alpha=1}^{m} \bar{c}_\alpha{}^b \quad (\beta = 1, 2, \ldots, m-\nu)$$

$$b = \nu''_{\alpha\beta} - \nu'_{\alpha\beta}, \quad a = \sum_{\alpha=1}^{m} b$$

В случае неравновесной смеси газов, $m - \nu$ уравнений равновесия заменяются на $m - \nu$ уравнений диффузии химических компонентов [4]

$$\nabla(\rho\bar{c}_\alpha \mathbf{V} + \bar{\mathbf{J}}_\alpha) = \sum_{\beta=1}^{N} b\left(K_{f\beta}\rho^\Omega \prod_{l=1}^{m} \bar{c}_l{}^\omega - K_{b\beta}\rho^s \prod_{l=1}^{m} \bar{c}_l{}^\sigma\right) \quad (\alpha=1, 2, \ldots, m-\nu)$$

$$\omega = \nu'_{l\beta}, \quad \Omega = \sum_{l=1}^{m} \omega, \quad \sigma = \nu''_{l\beta}, \quad s = \sum_{l=1}^{m} \sigma$$

Соотношения Стефана — Максвелла [5]

$$\sum_{\alpha=1,\,\alpha\neq\beta}^{m} \frac{\bar{c}_\alpha \bar{c}_\beta}{\rho D_{\alpha\beta}} \left(\frac{\mathbf{J}_\alpha}{c_\alpha} - \frac{\mathbf{J}_\beta}{c_\beta}\right) = \left(\sum_{\alpha=1}^{m} \bar{c}_\alpha\right)^2 \nabla \sum_{\alpha=1}^{m} \frac{\bar{c}_\beta}{\bar{c}_\alpha} +$$

$$+ \nabla \ln T \sum_{\alpha=1,\,\alpha\neq\beta}^{m} \frac{\bar{c}_\alpha \bar{c}_\beta}{\rho D_{\alpha\beta}} \left(\frac{D_\alpha{}^T}{c_\alpha} - \frac{D_\beta{}^T}{c_\beta}\right) \quad (\beta = 1, 2, \ldots, m-1)$$

$$\sum_{\alpha=1}^{m} \mathbf{J}_\alpha = 0$$

Уравнение состояния

$$p = \rho RT \sum_{\alpha=1}^{m} \bar{c}_\alpha$$

Здесь $\mathbf{V}$, ρ, p, T, μ, λ—соответственно вектор скорости, плотность, давление, температура, коэффициенты вязкости и теплопроводности смеси газов; c_α, h_α, $D_{\alpha\beta}$, $D_\alpha{}^T$, $\mathbf{J}_\alpha$ — концентрация, удельная энтальпия, коэффициенты бинарной диффузии и термодиффузии, вектор плотности диффузионного потока компонента α; $n_{\tau\alpha}$ — количество атомов химического элемента τ в компоненте α; $\nu_{\alpha\beta}'$ ($\nu_{\alpha\beta}''$) — стехиометрические коэффициенты α в β-й прямой (обратной) реакции; $K_{p\beta}$ — константа равновесия β-й реакции; $K_{f\beta}$, $K_{b\alpha}$ — константы скоростей β-й прямой, α-й обратной реакции; R — универсальная газовая постоянная; ∇ — оператор Гамильтона, $\Delta = \nabla^2$; N — число неравновесных химических реакций

$$\bar{c}_\alpha = c_\alpha / M_\alpha, \quad \bar{\mathbf{J}}_\alpha = \mathbf{J}_\alpha / M_\alpha$$

M_α — молекулярный вес компонента α.

Для замыкания системы выписанных уравнений необходимо воспользоваться термодинамическими соотношениями для коэффициентов переноса и представлениями h_α и $K_{p\beta}$, $K_{f\beta}$, $K_{b\alpha}$ как функций температуры.

2. Будем искать преобразование координат и искомых функций, относительно которого система исходных уравнений и замыкающих функциональных зависимостей обладает свойством инвариантности. Рассмотрим

преобразование сжатия или растяжения вида

$$x = x^*\xi, \quad y = y^*\eta$$
$$\varphi = \varphi^*\Phi^\circ \quad (\varphi = u, v, p, \rho, T, \ldots)$$

После несложных выкладок получим, что искомое преобразование имеет вид

$$\xi = \eta = 1/C, \quad J_\alpha^\circ = \rho^\circ = p^\circ = C, \quad D_{\alpha\beta}^\circ = 1/C \tag{2.1}$$

где C — произвольная постоянная.

При этом должны выполняться условия:

в случае равновесных химических реакций

$$a = 0 \tag{2.2}$$

в случае неравновесных химических реакций

$$\Omega = s = 2 \tag{2.3}$$

Полагая $C \neq 1$, что соответствует условию нетривиальности найденного преобразования (2.1), получаем

$$\rho x = \rho^*(z), \quad px = p^*(z) \quad J_\alpha x = I_\alpha(z), \quad D_{\alpha\beta}\, p = d_{\alpha\beta}(z) \tag{2.4}$$

где $z = y / x$.

Условие (2.2) означает требование эквимолекулярности равновесных химических реакций, а условие (2.3) — второй порядок прямых и обратных реакций в неравновесном случае.

Подставляя найденное автомодельное решение (2.4) в уравнение неразрывности, получаем

$$zu(z) = v(z) \tag{2.5}$$

Из (2.5) следует, что решение (2.4) отвечает течению типа источника, расположенного в начале координат.

Если ограничиться рассмотрением течений внутри плоского двугранного угла, то решение (2.4) с учетом (2.5) обладает свойством постоянства расхода вдоль канала (ось x в этом случае есть продольная координата).

Ниже показано, что для найденного решения, как и в случае решения Гамеля, можно удовлетворить условию прилипания на стенках канала, и рассмотрен вопрос о постановке других граничных условий.

3. Перейдем к полярной системе координат r, θ. Учитывая (2.4) и (2.5), будем искать решение в виде

$$\begin{gathered}
v_r = w(\theta), \quad p = r^{-1}p^*(\theta), \quad h_\alpha = h_\alpha(\theta) \\
v_\theta \equiv 0, \quad \rho = r^{-1}\rho^*(\theta), \quad c_\alpha = c_\alpha(\theta) \\
T = T(\theta), \quad D_{\alpha\beta} = p^{-1}d_{\alpha\beta}(\theta), \quad \mu = \mu(\theta) \\
D_\alpha^T = D_\alpha^T(\theta), \quad K_{pl} = K_{pl}(\theta), \quad K_{fi} = K_{fi}(\theta) \\
K_{bi} = K_{bi}(\theta), \quad \lambda = \lambda(\theta), \quad J_{\alpha r} = r^{-1}I_\alpha(\theta), \quad J_{\alpha\theta} \equiv 0 \\
(\alpha, \beta = 1, 2, \ldots, m; \; l = 1, 2, \ldots, m - \nu; \; i = 1, 2, \ldots, N)
\end{gathered} \tag{3.1}$$

где v_r, $J_{\alpha r}$, v_θ, $J_{\alpha\theta}$ — соответственно радиальные и угловые составляющие вектора скорости и вектора плотности диффузионного потока компонента α.

Последнее из представлений (3.1) является следствием соотношений Стефана — Максвелла, записанных в проекции на направление θ.

Уравнения, описывающие рассматриваемое автомодельное течение, в безразмерном виде в полярной системе координат имеют вид

уравнения движения

$$p^* \operatorname{Re} + \varkappa M^2 \left[\frac{d}{d\theta}\left(\mu \frac{dw}{d\theta}\right) - \frac{4}{3}\mu w \right] = 0 \tag{3.2}$$

$$\left(\frac{4}{3}\frac{d\mu w}{d\theta} + \mu \frac{dw}{d\theta}\right)\varkappa M^2 - \operatorname{Re}\frac{dp^*}{d\theta} = 0 \tag{3.3}$$

уравнение сохранения энергии

$$\frac{d}{d\theta}\left[\mu \frac{c_p}{\Pr}\frac{dT}{d\theta} + \frac{M^2}{2}(\varkappa - 1)\mu \frac{dw^2}{d\theta} - \frac{1}{\operatorname{Sm}}\sum_{\alpha=1}^{m} I_\alpha h_\alpha\right] = 0 \tag{3.4}$$

уравнения диффузии химических элементов

$$\sum_{\alpha=1}^{m} n_{\tau\alpha}\frac{dI_\alpha}{d\theta} = 0 \qquad (\tau = 1, 2, \ldots, \nu - 1) \tag{3.5}$$

$$\sum_{\alpha=1}^{m} \frac{dc_\alpha}{d\theta} = 0 \tag{3.6}$$

соотношения Стефана — Максвелла

$$\begin{gathered}\sum_{\alpha=1,\,\alpha\neq\beta}^{m} \frac{p^*\bar{c}_\alpha \bar{c}_\beta}{\rho^* d_{\alpha\beta}}\left(\frac{I_\alpha}{c_\alpha} - \frac{I_\beta}{c_\beta}\right) = \left(\sum_{\alpha=1}^{m}\bar{c}_\alpha\right)^2 \sum_{\alpha=1}^{m}\frac{d}{d\theta}\left(\frac{\bar{c}_\beta}{\bar{c}_\alpha}\right) + \\ + \frac{d\ln T}{d\theta}\sum_{\alpha=1,\,\alpha\neq\beta}^{m}\frac{p^*\bar{c}_\alpha \bar{c}_\beta}{\rho^* d_{\alpha\beta}}\left(\frac{D_\alpha{}^T}{c_\alpha} - \frac{D_3{}^T}{c_\beta}\right) \qquad (\beta = 1, 2, \ldots, m-1) \\ \sum_{\alpha=1}^{m} I_\alpha = 0\end{gathered} \tag{3.7}$$

уравнение состояния

$$p^* = \rho^* T \sum_{\alpha=1}^{m} \bar{c}_\alpha \tag{3.8}$$

уравнения химического равновесия (в случае равновесной смеси)

$$\frac{d}{d\theta}(\ln K_{p\beta}) = \sum_{\alpha=1}^{m} (\nu''_{\alpha\beta} - \nu'_{\alpha\beta})\frac{d}{d\theta}(\ln \bar{c}_\alpha) \qquad (\beta = 1, 2, \ldots, m - \nu) \tag{3.9}$$

уравнения диффузии химических компонентов (в случае неравновесной смеси)

$$\frac{d\bar{I}_\alpha}{d\theta} = \operatorname{Re}\operatorname{Sm}\sum_{\beta=1}^{N}(\nu''_{\alpha\beta} - \nu'_{\alpha\beta})\left(K_{f\beta}\prod_{l=1}^{m}\bar{c}_l{}^{\omega} - K_{b\beta}\prod_{l=1}^{m}\bar{c}_l{}^{\sigma}\right)(\rho^*)^2 \tag{3.10}$$

$$(\alpha = 1, 2, \ldots, m - \nu)$$

При обезразмеривании в качестве характерных величин были выбраны

$$w_0,\ \rho_0^*,\ T_0,\ \mu_0,\ \lambda_0,\ c_{p_0},\ p_0^* = \rho_0^* R T_0 \quad D_{\alpha\beta 0} = (p_0^*)^{-1} d_{\alpha\beta 0}$$

равные соответствующим величинам в точке $\theta = 0$. При этом λ_0, μ_0, c_{p_0} —

соответственно коэффициент теплопроводности, коэффициент вязкости, удельная теплоемкость при постоянном давлении смеси газов

$$\mathrm{Re} = \frac{\rho_0^* w_0}{\mu_0}, \quad \mathrm{Pr} = \frac{c_{p_0}\mu_0}{\lambda_0}, \quad \mathrm{Sm} = \frac{\mu_0}{\rho_0^* D_{\alpha\beta 0}},$$

$$M^2 = \frac{w_0^2}{\varkappa R T_0} \qquad \left(\varkappa = \frac{c_{p_0}}{c_{v_0}},\ c_{v_0} = c_{p_0} - R\right)$$

Re — число Рейнольдса, Pr — число Прандтля для смеси газов, Sm— число Шмидта, вычисленное по какому-либо (например, наибольшему) из характерных бинарных коэффициентов диффузии смеси, M — число Маха.

Остановимся на некоторых общих свойствах найденного автомодельного решения (3.1).

Продифференцируем (3.2) и результат сложим с (3.3). Решение полученного дифференциального уравнения

$$\frac{d^2}{d\theta^2}\left(\mu \frac{dw}{d\theta}\right) + \mu \frac{dw}{d\theta} = 0$$

имеет вид

$$\mu \frac{dw}{d\theta} = A \cos(\theta + \vartheta)$$

где A и ϑ — произвольные постоянные.

В случае симметричного течения внутри плоского сопла, т. е. $dw/d\theta = 0$, при $\theta = 0$, с учетом (3.2) имеем

$$\mu\, dw/d\theta = A \sin \theta$$
$$(A = {}^4/_3 - \mathrm{Re} / (\varkappa M^2))$$

Потребуем, чтобы при $\theta = \theta_w$, где θ_w — угол полураствора сопла, выполнялось условие прилипания, т. е. $w\ (\theta_w) = 0$. Из (3.2) получаем выражение для давления на стенке сопла

$$p_w^* = p^*(\theta_w) = -(\varkappa M^2 / \mathrm{Re})\, A \cos \theta_w$$

откуда следует, что

$$\theta_w < \pi/2$$

Удовлетворить условию прилипания на стенке сопла возможно, если выбирать $A < 0$, т. е. когда

$$\mathrm{Re} > {}^4/_3\, \varkappa M^2$$

Проинтегрировав один раз (3.4), учитывая (3.5), получим

$$\mathrm{Sm}\,\mu \frac{c_p}{\mathrm{Pr}} \frac{dT}{d\theta} + (\varkappa - 1) M^2 A w \sin\theta - \sum_{\alpha=1}^{m} I_\alpha h_\alpha = C^* \tag{3.11}$$

где C^* — константа интегрирования. В случае симметричного течения $C^* = 0$. Из (3.6) с учетом $C^* = 0$ следует, что условие некаталитичности стенок сопла ($I_\alpha\ (\theta_w) = 0, \alpha = 1, 2, \ldots, m$) выполняется лишь для адиабатических стенок, т. е. когда $(dT / d\theta)_w = 0$.

Отметим еще одно свойство автомодельных решений. Из (3.5) следует, что

$$\sum_{\alpha=1}^{m} n_{\tau\alpha} I_\alpha = C_\tau^{**} \qquad (\tau = 1, 2, \ldots, \nu - 1) \tag{3.12}$$

где C_τ^{**} — константы интегрирования. Принимая во внимание условия симметрии течения, получаем, что $C_\tau^{**} = 0$, т. е. концентрации химических элементов остаются постоянными в потоке.

4. Рассмотрим более подробно схему расчета симметричного течения равновесной смеси газов в плоском сопле. В качестве исходных возьмем уравнения (3.6) — (3.12).

Условно разобьем задачу на динамическую и диффузионную части. К первой отнесем уравнения движения и сохранения энергии, ко второй — остальные уравнения. Условие эквимолекулярности реакций позволяет найти решение диффузионной части задачи в виде зависимостей концентраций от температуры. Подставив это решение в уравнение сохранения энергии, будем искать решение задачи в целом.

Решение уравнений диффузионной части задачи (3.6) — (3.9), (3.12) представим в виде зависимостей градиентов концентраций и плотностей диффузионных потоков компонентов от градиента температуры

$$dc_\alpha / d\theta = f_\alpha(c_1, \ldots, c_m, T)\, dT / d\theta \qquad (\alpha = 1, 2, \ldots, m) \tag{4.1}$$

$$I_\alpha = F_\alpha(c_1, \ldots, c_m, T)\, dT / d\theta \qquad (\alpha = 1, 2, \ldots, m) \tag{4.2}$$

Из (3.11) с учетом (4.2) имеем

$$\frac{dT}{d\theta} = -\frac{\mathrm{Sm}\,\mathrm{Pr}\, M^2(\varkappa - 1)\, Aw \sin\theta}{c_p \mathrm{Sm}\,\mu - \mathrm{Pr}\sum\limits_{\alpha=1}^{m} F_\alpha h_\alpha} \tag{4.3}$$

Численное решение поставленной задачи может быть найдено интегрированием системы обыкновенных дифференциальных уравнений (3.10), (3.11), (4.1), (4.3) стандартным численным методом.

В качестве граничных условий задачи можно использовать условия симметрии течения (при $\theta = 0$)

$$\frac{dc_\alpha}{d\theta} = 0 \quad (\alpha = 1, 2, \ldots, m), \qquad \frac{dT}{d\theta} = \frac{dw}{d\theta} = 0$$

условие прилипания (при $\theta = \theta_w$) $w = 0$.

Численное решение получается в процессе интегрирования системы уравнений от $\theta = 0$ до $\theta = \theta_w$, при котором $w(\theta_w) = 0$. Из (4.3) следует, что тогда $(dT/d\theta)_w = 0$, т. е. выполняется условие адиабатичности (некаталитичности) стенки сопла.

5. В качестве примера приведем результаты численных расчетов течений равновесной смеси газов, состоящей из четырех компонентов — H_2, H_2O, CO, CO_2. Предполагаем, что в потоке имеет место следующая эквимолекулярная реакция:

$$H_2O + CO \rightleftarrows CO_2 + H_2$$

Константа равновесия этой реакции может быть представлена как отношение констант равновесия реакций

$$2H_2O \rightleftarrows 2H_2 + O_2, \quad 2CO + O_2 \rightleftarrows 2CO_2$$

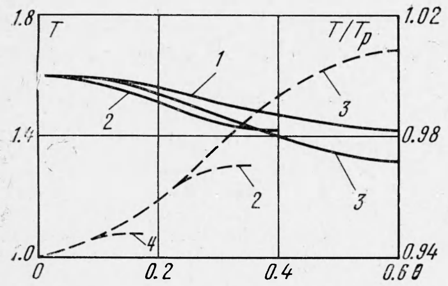
и связана с концентрациями химических компонентов следующим уравнением равновесия:

$$K_p = \bar{c}_1\bar{c}_2 / \bar{c}_3\bar{c}_4 \qquad (c_1 = c_{H_2O},\ c_2 = c_{CO},\ c_3 = c_{CO_2},\ c_4 = c_{H_2})$$

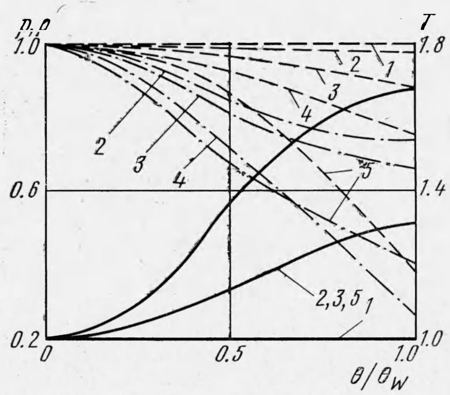
Коэффициент вязкости смеси вычислялся по формуле [6], а число Прандтля смеси

$$\Pr = c_p \,/\, (1.204\, c_p + 1.47)$$

где c_p — удельная теплоемкость смеси газов. Удельные теплоемкости и энтальпии компонентов вычислялись с использованием интерполяционных формул, приведенных в [7].



Фиг. 1

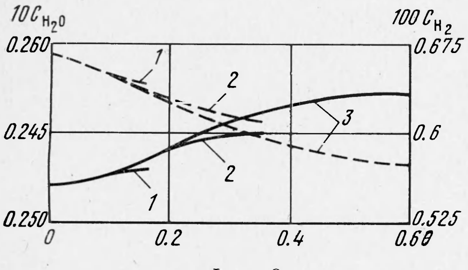


Фиг. 2

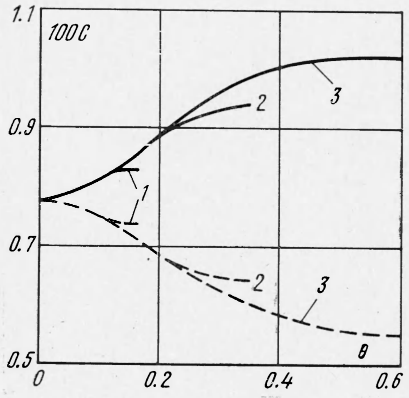
Численные расчеты выполнены для случая T (0) = 1700° K и отсутствия термодиффузии. Результаты расчетов представлены на фиг. 1—4. *На фиг.* 1 изображены профили приведенной температуры $T \,/\, T_p$ (сплошные линии), где T_p — температура, отвечающая течению замороженной смеси газов

$$T_p = (\varkappa - 1)\, M^2 \Pr\, (1 - w^2) \,/\, 2\, cp + 1$$

профили температуры (штриховые линии). Номера кривых соответствуют течениям при различных значениях чисел M и Re: *2* — $M = 2$, Re = 100; *3* — $M = 3$, Re = 100; *4* — $M = 1$, Re = 100. Для сравнения показан профиль приведенной температуры $T \,/\, T_p$ для случая $M = 3$, Re = 100



Фиг. 3



Фиг. 4

и отсутствия диффузии (кривая *1*). На фиг. 2 представлены профили температуры (сплошные линии), давления (штриховые линии), плотности (штрихпунктирные линии): *1* — $M = 0.2$, Re = 100; *2* — $M = 2$, Re = = 1000; *3* — $M = 2$, Re = 100; *4* — $M = 3$, Re = 100; *5* — $M = 2$, Re = 20.

На фиг. 3 изображены профили приведенных концентраций $\bar{c}$ водяного пара (сплошные линии) и молекулярного водорода (штриховые линии), соответствующие течениям с числом Re = 100 и различными числами M: *1* — $M = 1$; *2* — $M = 2$, *3* — $M = 3$.

На фиг. 4 представлены профили приведенных концентраций окиси углерода (сплошные линии) и углекислого газа (штриховые линии). Соответствие номеров кривых и значений параметров течения то же, что и на фиг. 3.

Поступила 26 III 1971

ЛИТЕРАТУРА

1. *Williams J. C.* III. Conical nozzle flow with velocity slip and temperature jump. AIAA Journal, 1967, vol. 5, No. 12.
2. *Быркин А. П.* Об одном точном решении уравнений Навье — Стокса для сжимаемого газа. ПММ, 1969, т. 33, вып. 1.
3. *Щенников В. В.* Об одном классе точных решений уравнений Навье — Стокса для случая сжимаемого теплопроводного газа. ПММ, 1969, т. 33, вып. 3.
4. *Алексеев Б. В.* Пограничный слой с химическими реакциями. М., ВЦ АН СССР, 1967.
5. *Гиршфельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р.* Молекулярная теория газов и жидкостей. М., Изд-во иностр. лит., 1961.
6. *Бретшнайдер С.* Свойства газов и жидкостей. М.— Л., «Химия», 1966.
7. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Справочник. М., Изд-во АН СССР, 1962.