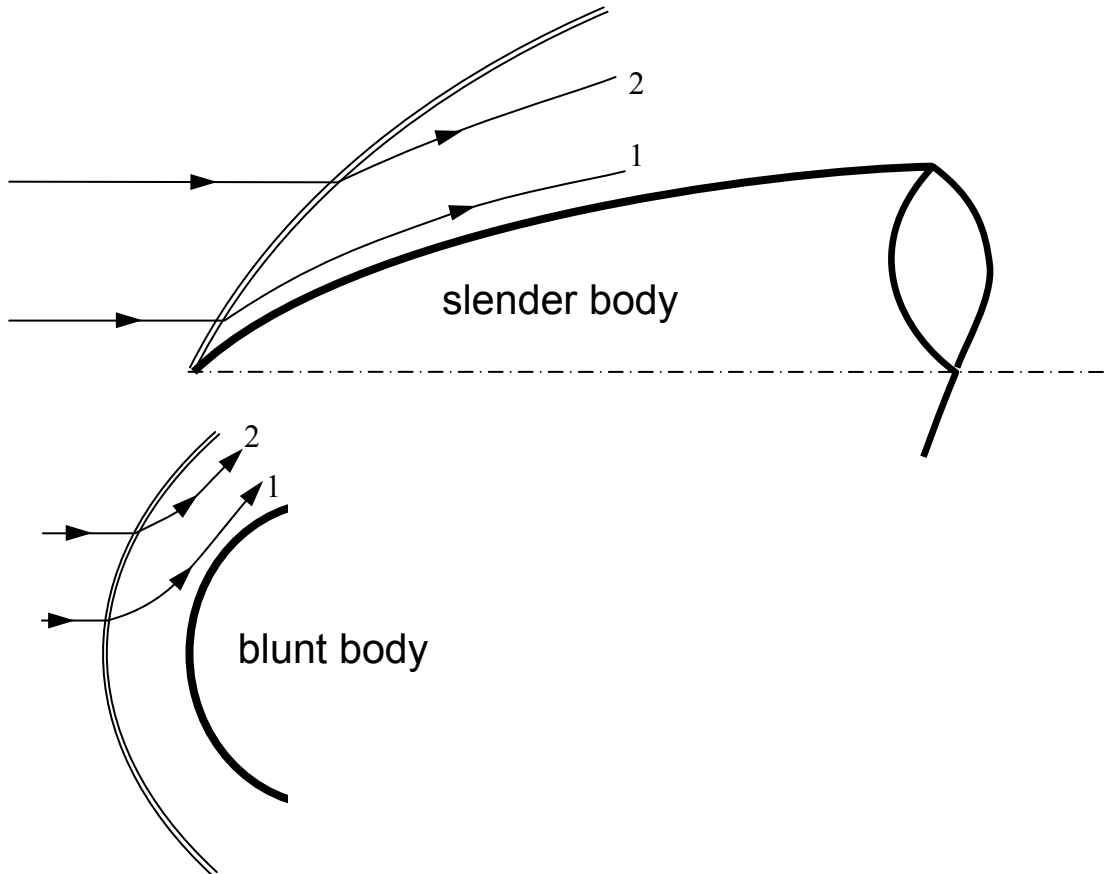


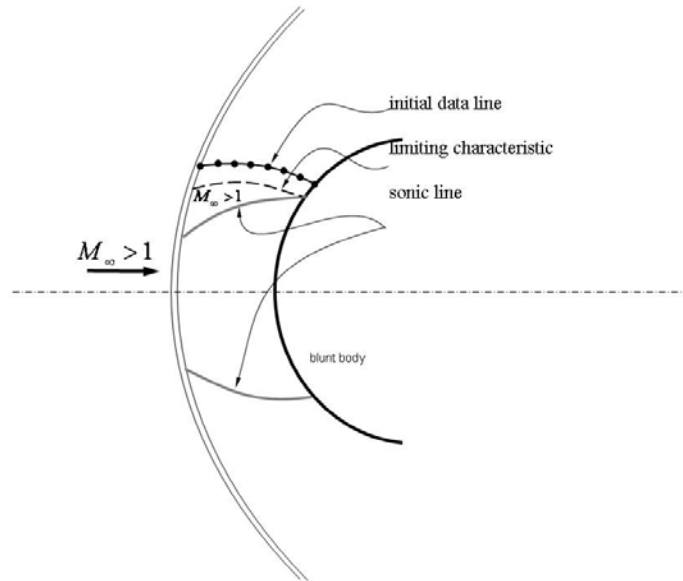
Ροές με σημαντική συμπίεστικότητα

Είναι γνωστό από την μηχανική ρευστών ότι μη συνεκτικές ροές με σημαντική συμπίεστικότητα δεν είναι κατ'ανάγκη χωρίς περιστροφή ακόμη και όταν η ροή θεωρείται αρχικά χωρίς στροβιλισμό. Για να κατανοήσουμε την σημασία της περιστροφής σε ροές υψηλής ταχύτητας θεωρούμε ροή σε αριθμό υπερηχητικό αριθμό Mach $M_\infty > 1$ γύρω από σώματα που απεικονίζεται στο παρακάτω σχήμα.



Η ισχύς των οστικών κυμάτων αυξάνεται με την αύξηση την ταχύτητας ροής (με την αύξηση του αριθμού Mach). Τα οστικά κύματα και στις δύο περιπτώσεις έχουν καμπυλότητα και όπως γνωρίζουμε η εντροπία αυξάνεται κατά μήκος του οστικού κύματος. Συνεπώς, υπάρχει διαφορά εντροπίας μεταξύ των γραμμών ροής που φαίνονται στο σχήμα. Και στις δύο περιπτώσεις, η εντροπία είναι μεγαλύτερη στη γραμμή ροής 1 διότι η γραμμή αυτή διέρχεται από την περιοχή όπου το οστικό κύμα είναι πιο ισχυρό. Λόγω της μεταβολής της εντροπίας και σύμφωνα με το θεώρημα του Crocco, $T\nabla s = \nabla h_0 - \vec{V} \times (\nabla \times \vec{V})$, έχουμε παραγωγή στροβιλισμού μετά από το οστικό κύμα διότι για ανεξάρτητη από τον χρόνο αδιαβατική ροή η κλίση της ολικής ενθαλπίας είναι μηδενική ∇h_0 και $T\nabla s = -\vec{V} \times \Omega$. Συνεπώς η απλοποίηση των εξισώσεων ροής που επιτυγχάνεται για μη συνεκτικές ροές χωρίς στροβιλισμό δεν είναι πλέον δυνατή για την ροή μετά το οστικό κύμα.

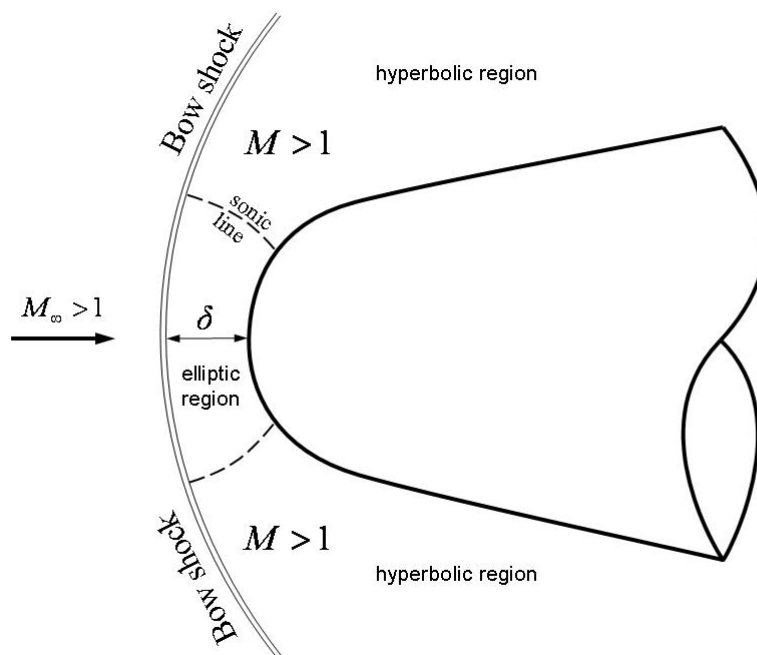
Η μη-συνεκτική υπερηχητική ροή μπορεί να υπολογισθεί αναλυτικά με την μέθοδο των χαρακτηριστικών, η εφαρμογή της οποίας για υπερηχητική ροή γύρω από ένα αμβλύ σώμα φαίνεται στο παρακάτω σχήμα



Αρχικά θεωρούμε σημεία υπολογισμού πέραν την οριακής χαρακτηριστικής όπου η ροή είναι υπερηχητική. Ο υπολογισμός της ροής μπορεί να αρχίσει από αυτά τα σημεία υπολογισμού με την λύση των εξισώσεων συμβατότητας (compatibility equations) κατά μήκος των χαρακτηριστικών γραμμών ενώ κατά μήκος των γραμμών ροής $ds = 0$ και $dp = a^2 dr$ ο δε υπολογισμός είναι αναλυτικός έχει όμως το μειονέκτημα ότι δεν περιλαμβάνει την υποηχητική περιοχή της ροής.

Ο υπολογισμός των χαρακτηριστικών της ροής στην περιοχή μεταξύ των γραμμών όπου η ταχύτητα είναι υποηχητική έχει μεγάλη σημασία για την πρόβλεψη των θερμικών φορτίων. Για τον λόγο αυτό αναπτύχθηκαν άλλες μέθοδοι που επιτρέπουν το υπολογισμό των χαρακτηριστικών ροής σε όλο το πεδίο από το ωστικό κύμα μέχρι και την επιφάνεια του σώματος. Η μέθοδοι αυτοί είναι υπολογιστικές και η απλούστερη αυτών περιγράφεται παρακάτω.

Το πεδίο ροής γύρω από ένα αμβλύ σώμα που κινείται με υπερηχητική ταχύτητα παρουσιάζεται στο παρακάτω σχήμα.



Το καμπύλο ωστικό κύμα περιλαμβάνει όλες τις πιθανές περιπτώσεις πλαγίου ωστικού κύματος για τον δεδομένο αριθμό Mach, M_∞ , με γωνίες κύματος $\pi/2 \leq \beta < \mu$ όπου μ είναι η γωνία Mach. Οι εξισώσεις που περιγράφουν την κίνηση για συμπιεστή μη συνεκτική ροή είναι οι εξισώσεις Euler των οποίων η μη συντηρητική μορφή είναι

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = - \left[\frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} \right]$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = - \left[u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} \right]$$

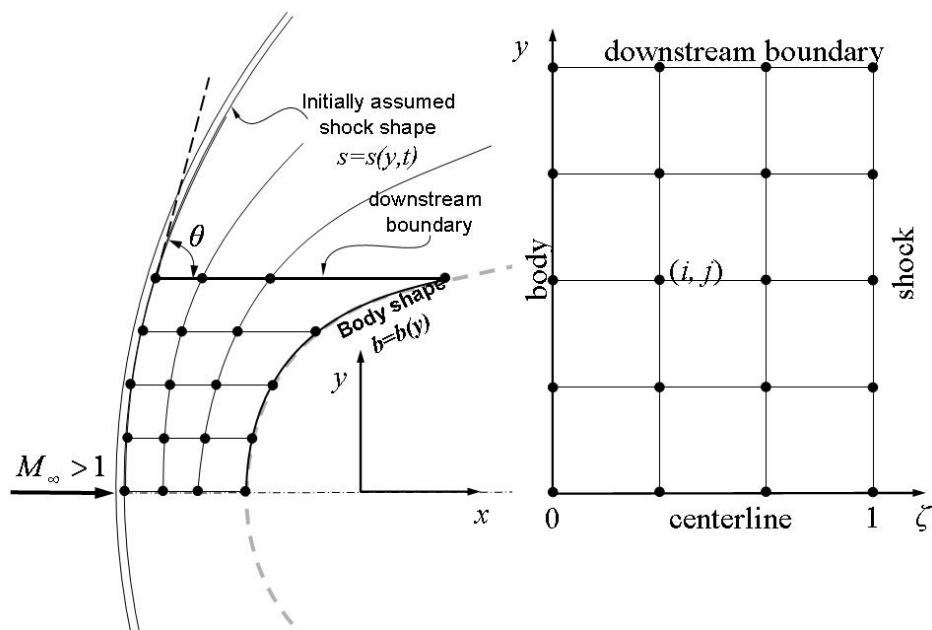
$$\frac{\partial v}{\partial t} = - \left[u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} \right]$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{p}{\rho^\gamma} \right) = - \left[u \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{p}{\rho^\gamma} \right) + v \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{p}{\rho^\gamma} \right) \right]$$

Moretti shock fitting method

Ο υπολογισμός της ροής, του σχήματος και της θέσης του ωστικού κύματος για δεδομένο σχήμα σώματος $b = b(y)$ επιτυγχάνεται με την με την παρακάτω μέθοδο (Moretti, G and Abbet, M. "A time-dependent computational method of blunt body flows," *AIAA Journal*, Vol. 4, 1958, pp. 485-495) που είναι γνωστή ως shock fitting method διότι συνέχεια προσαρμόζει το σχήμα του ωστικού κύματος μέχρι να επιτευχθεί σύγκλιση.

Αρχικά (σε χρόνο $t = 0$) υποθέτουμε ένα σχήμα του ωστικού κύματος $s = s(y, t = 0)$, όπως δείχνει το παρακάτω σχήμα, το οποίο σχήμα $s = s(y, t)$ θα μεταβληθεί κατά την διάρκεια της χρονικής ολοκλήρωσης όπως θα δείξουμε παρακάτω.



1. Δίδουμε αρχικές τιμές σε όλες τις μεταβλητές ρ, u, v, p σε όλους τους κόμβους του υπολογιστικού πλέγματος.
2. Υπολογίζουμε το πεδίο ροής με τις κατάλληλες οριακές συνθήκες με πεπερασμένες διαφορές. Για τον σκοπό αυτό χρησιμοποιούμε ένα μετασχηματισμό συντεταγμένων $\zeta = (x-b)/\delta$ όπου $\delta = s-b$ είναι η απόσταση του ωστικού κύματος που αρχικά υποθέσαμε.
3. Χρησιμοποιούμε τους μετασχηματισμούς μεταβλητών

$$P = \ln p$$

$$R = \ln \rho$$

$$\psi = \ln p - \gamma \ln \rho = P - \gamma R$$

4. Ορίζουμε επίσης τις βοηθητικές μεταβλητές

$$C = (\zeta - 1) \frac{db}{dy} - \zeta \cot \theta$$

$$W = \frac{ds}{dt} \quad x \text{ συνιστώσα της ταχύτητας ωστικού κύματος}$$

$$B = \frac{u - W\zeta + vC}{\delta}$$

5. Βρίσκουμε τις εξισώσεις κίνησης στις μετασχηματισμένες συντεταγμένες (ζ, y)

$$\frac{\partial R}{\partial t} = - \left[B \frac{\partial R}{\partial \zeta} + \frac{1}{\delta} \frac{\partial u}{\partial \zeta} + \frac{C}{\delta} \frac{\partial v}{\partial \zeta} + \frac{\partial v}{\partial y} + v \frac{\partial R}{\partial y} \right]$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = - \left[B \frac{\partial u}{\partial \zeta} + v \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{p}{\rho \delta} \frac{\partial p}{\partial \zeta} \right]$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = - \left[B \frac{\partial v}{\partial \zeta} + v \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{pC}{\rho \delta} \frac{\partial P}{\partial \zeta} + \frac{p}{\rho} \frac{\partial P}{\partial y} \right]$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = - \left[B \frac{\partial \psi}{\partial x} + v \frac{\partial \psi}{\partial y} \right]$$

Η αριθμητική επίλυση του παραπάνω συστήματος μπορεί να γίνει με την μέθοδο MacCormack

Μέθοδος MacCormack

Το πλήρες (διακριτό) σχήμα αριθμητικής επίλυσης που θα παρουσιασθεί παρακάτω βασίζεται στην μέθοδο predictor corrector του R. MacCormack που περιλαμβάνει τα εξής βήματα:

1. Θεωρούμε την χωρική διακριτοποίηση με κατάντη (forward) πεπερασμένες διαφορές πρώτης τάξης ακρίβειας. Η χωρικά διακριτή μορφή της x-εξίσωσης ορμής είναι π.χ. ως ακολούθως

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_{i,j}^t = - \left[B_{i,j}^t \left(\frac{u_{i+1,j}^t - u_{i,j}^t}{\Delta \zeta} \right) + v_{i,j}^t \left(\frac{v_{i,j+1}^t - v_{i,j}^t}{\Delta y} \right) + \left(\frac{p}{\rho \delta} \right)_{i,j}^t \left(\frac{p_{i+1,j}^t - p_{i,j}^t}{\Delta \zeta} \right) \right]$$

Στην παραπάνω ημι-διακριτή μορφή η χρονική παράγωγος δεν έχει διακριτοποιηθεί.

2. Θεωρούμε μία πρόβλεψη (prediction) όλων των εξαρτημένων μεταβλητών ως το πρώτης τάξης ανάπτυγμα της σειράς Taylor, η πρόβλεψη, $\bar{u}_{i,j}^{t+\Delta t}$, για την ταχύτητα π.χ είναι

$$\bar{u}_{i,j}^{t+\Delta t} = u_{i,j}^t + \left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_{i,j}^t \Delta t$$

3. Το βήμα διόρθωσης της μεθόδου MacCormack είναι η χωρική διακριτοποίηση με ανάντη (backward) πεπερασμένες διαφορές πρώτης τάξης ακρίβειας. Η χωρικά διακριτή μορφή της x-εξίσωσης ορμής για τις προβλέψεις $\bar{B}_{i,j}^{t+\Delta t}$, $\bar{u}_{i,j}^{t+\Delta t}$, $\bar{p}_{i,j}^{t+\Delta t}$ είναι π.χ. ως ακολούθως

$$\left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial t}\right)_{i,j}^{t+\Delta t} = - \left[\bar{B}_{i,j}^t \left(\frac{\bar{u}_{i,j}^{t+\Delta t} - \bar{u}_{i-1,j}^{t+\Delta t}}{\Delta \zeta} \right) + \bar{v}_{i,j}^{t+\Delta t} \left(\frac{\bar{v}_{i,j}^{t+\Delta t} - \bar{v}_{i,j-1}^{t+\Delta t}}{\Delta y} \right) + \left(\frac{\bar{p}}{\bar{\rho} \delta} \right)_{i,j}^{t+\Delta t} \left(\frac{\bar{p}_{i,j}^{t+\Delta t} - \bar{p}_{i-1,j}^{t+\Delta t}}{\Delta \zeta} \right) \right]$$

4. Η χρονική παράγωγος εκτιμάται ως ο μέσος όρος των χρονικών παραγώγων που υπολογίστηκαν από τα στάδια (1) και (3)

$$\left[\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_{i,j} \right]_{\text{average}} = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_{i,j}^t + \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial t}\right)_{i,j}^{t+\Delta t} \right]$$

5. Η τιμή των εξαρτημένων μεταβλητών στο χρονικό βήμα $t + \Delta t$ υπολογίζεται ως

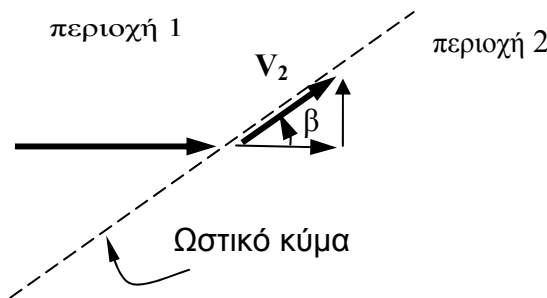
$$u_{i,j}^{t+\Delta t} = u_{i,j}^t + \left[\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_{i,j} \right]_{\text{average}} \Delta t$$

Η μέθοδος MacCormack όπως υλοποιείται στα στάδια (1) – (5) είναι δεύτερης τάξης ακρίβειας χρονικά αλλά και χωρικά, παρ όλον ότι χρησιμοποιούνται πρώτης τάξης διακριτοποιήσεις στον χώρο στα στάδια (1) και (3) διότι ο συνδυασμός τους στα βήματα (4) και (5) δίνει δεύτερης τάξης χωρική ακρίβεια

Η μέθοδος των χαρακτηριστικών που είναι ουσιαστικά αναλυτική έχει περιορισμένη εφαρμογή. Η μέθοδος shock fitting του Moretti όπως υλοποιείται με την μέθοδο MacCormack ή με οποιονδήποτε άλλο αλγόριθμο επίλυσης έχει σήμερα περιορισμένη χρήση διότι είναι κατάλληλη μόνο για τον υπολογισμό ωστικών κυμάτων (και όχι άλλων μορφών ασυνεχειών όπως η ασυνέχεια επαφής), δεν μπορεί να χρησιμοποιηθεί για αλληλεπιδρώντα ωστικά κύματα, και έχει δε το σημαντικό μειονέκτημα ότι δεν βρίσκει το ωστικό κύμα σαν μέρος της λύσης σε όλο το χωρίο. Για τους παραπάνω λόγους η αριθμητική επίλυση υπερηχητικών ροών με ασυνέχειες πραγματοποιείται με μεθόδους που βρίσκουν το ωστικό κύμα και άλλες ασυνέχειες σαν μέρος της λύσης και είναι γνωστά ως shock capturing schemes. Στην συνέχεια θα παρουσιάσουμε μία κατηγορία αυτών των μεθόδων τα essentially non-oscillatory (ENO) shock capturing schemes.

1. Ροές αερίων με υψηλές θερμοκρασίες

Ενδιαφέρον για τις ροές αερίων σε υψηλές θερμοκρασίες προήλθε από την περιοχή της καύσης, lasers, και την μελέτη και ποσοτικοποίηση του πεδίου ροής κατά την επαν-είσοδο στην ατμόσφαιρα διατημο-οχημάτων. Οι θερμοκρασίες που αναπτύσσονται σε σύγχρονους κινητήρες turbojet είναι αρκετά μεγάλες, ενώ κατά την επαν-είσοδο στην ατμόσφαιρα με Mach $M > 10$ δημιουργούνται ισχυρά ωστικά κύματα και αναπτύσσονται μεγάλες θερμοκρασίες. Θεωρώντας παραδείγματος χάριν την ροή επαν-εισόδου στην ατμόσφαιρα με Mach της τάξης 30, $M = O(30)$, και θερμοκρασία περιβάλλοντος πριν από το ωστικό κύμα 280 K από την εξίσωση που μας δίνει την θερμοκρασιακή διαφορά πριν και μετά το ωστικό κύμα βρίσκουμε ότι η θερμοκρασία μετά το ωστικό κύμα είναι της τάξης των 50000 K!



$$\frac{T_2}{T_1} = \frac{2\gamma(\gamma-1)}{\gamma+1} (M_1 \sin \beta)^2$$

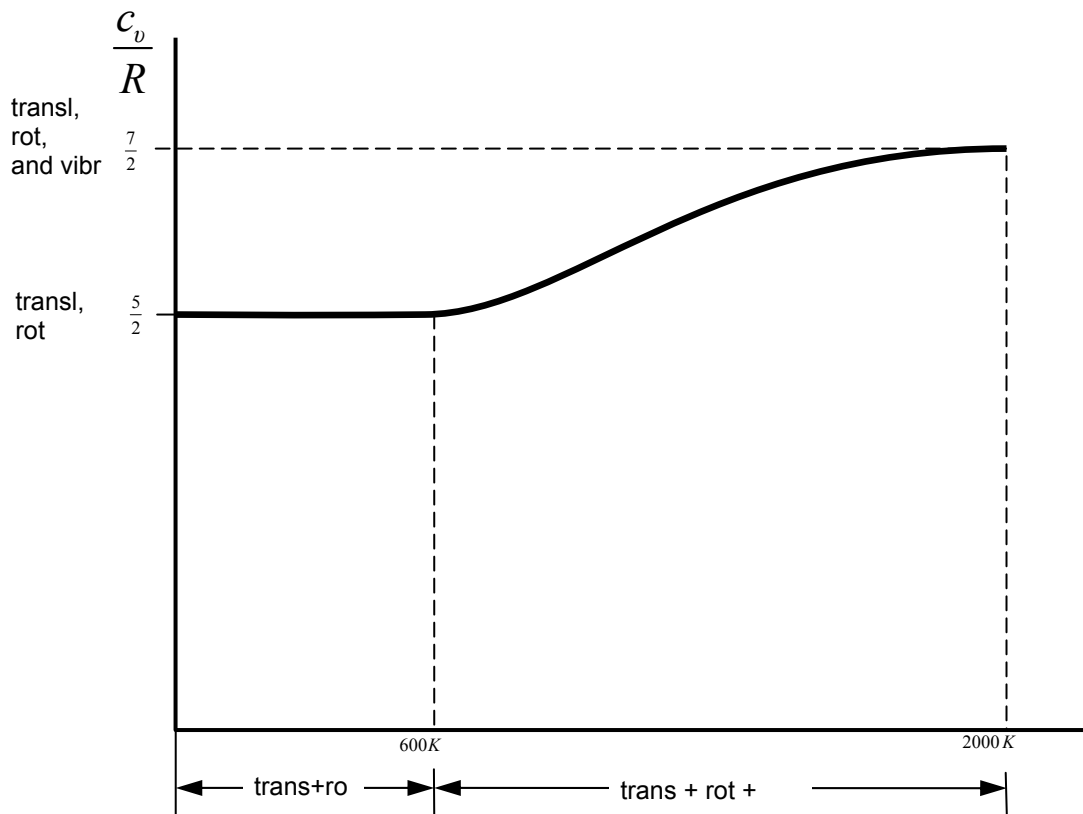
Πρέπει να σημειωθεί ότι με την χρήση της σχέσης για την θερμοκρασία πριν και μετά το ωστικό κύμα και για τιμή της σταθερής των αερίων για μίγμα (O_2, N_2) της ατμόσφαιρας, $\gamma = c_p / c_v = 1.4$ η θερμοκρασία μετά το ωστικό κύμα υπερεκτιμάται, διότι καθ' όσον αυξάνεται η θερμοκρασία και, όπως θα αναφέρουμε παρακάτω, ο αέρας γίνεται χημικά ενεργός η σχέση, $T_2 / T_1 = 2\gamma(\gamma-1)(M_1 \sin \beta)^2 / \gamma+1$, που χρησιμοποιήσαμε για το υπολογισμό της θερμοκρασίας, κατάντη του ωστικού κύματος, δεν ισχύει διότι η τιμή της σταθεράς των αερίων μεταβάλλεται. Λόγω της μεγάλης θερμοκρασία συμβαίνουν ενδόθερμες χημικές αντιδράσεις και η σχέση $c_p - c_v = R$ που ισχύει για καλορικά τέλειο αέριο (calorically perfect gas $h = c_p T, e = c_v T$) και για θερμικά τέλειο αέριο (thermally perfect gas, $h = h(T), e = e(T), c_p = f_{cp}(T), c_v = f_{cv}(T)$) δεν ισχύει αλλά αντικαθίσταται από την σχέση

$$c_p - c_v = \left[\left(\frac{\partial e}{\partial v} \right)_p + p \right] \left(\frac{\partial v}{\partial T} \right)_p$$

η οποία και ισχύει για κάθε είδους αέριο, πραγματικό ή ιδανικό, με η χωρίς χημικές αντιδράσεις. Στην γενική δε περίπτωση που έχουμε αέριο μίγμα $h = h(T, p), e = e(T, p), c_p = f_{cp}(T, p), c_v = f_{cv}(T, p)$, δηλαδή η ειδική θερμότητα υπό σταθερή πίεση και σταθερό όγκο είναι συνάρτηση της πίεσης και θερμοκρασίας. Επί πλέον, από την στατιστική θερμοδυναμική γνωρίζουμε ότι η ειδική θερμότητα υπό σταθερό όγκο δίνεται από την σχέση

$$c_v = \underbrace{\frac{3}{2}R}_{\text{transl}} + \underbrace{R}_{\text{rot}} + \underbrace{\frac{(h\nu/kT)^2 e^{h\nu/kT}}{(e^{h\nu/kT} - 1)^2} R}_{\text{vibr}} + \frac{\partial e_{\text{elect}}}{\partial T}$$

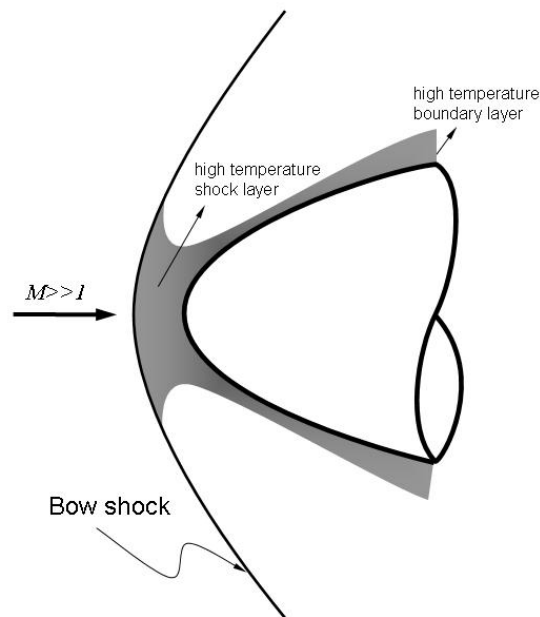
η οποία για αέρια με μόρια δύο ατόμων σε χαμηλές θερμοκρασίες, τα οποία έχουν μόνο μεταφορική και περιστροφική ενέργεια, δίνει $c_v = 5R/2$ και επειδή τότε ισχύει $c_p - c_v = R$ ο λόγος της ειδικής θερμότητας υπό σταθερή πίεση c_p ως προς την ειδική θερμότητα υπό σταθερό όγκο c_v είναι σταθερός $\gamma = c_p / c_v = 7/5 = 1.4$. Σε μεγάλες θερμοκρασίες εκτός των άλλων η ειδική θερμότητα υπό σταθερό όγκο c_v μεταβάλλεται με την θερμοκρασία και $\gamma = c_p / c_v = \gamma(T)$. Η μεταβολή της ειδικής θερμότητας υπό σταθερό όγκο c_v με την θερμοκρασία φαίνεται στο παρακάτω διάγραμμα



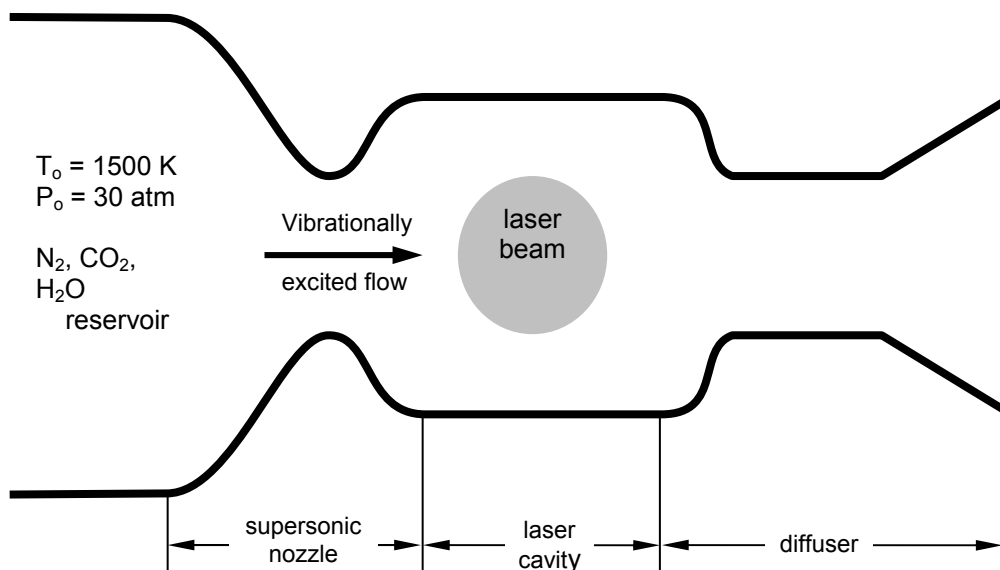
Σαν αποτέλεσμα, η τιμή της θερμοκρασίας μετά το ωστικό κύμα με Mach της τάξης 30, $M = O(30)$ που προκύπτει όταν λάβουμε υπ' όψη την μεταβλητότητα του γ με την αύξηση της θερμοκρασίας είναι της τάξης των 11000 K που είναι πάλι πολύ μεγάλη.

Η ροή υψηλής ταχύτητας γύρω από ένα σώμα απεικονίζεται στο παρακάτω σχήμα. Η μεγάλη κινητική ενέργεια $M \gg 1$ πριν από το bow shock μετατρέπεται σε εσωτερική ενέργεια κατά μήκος του ωστικού κύματος και προκαλεί μεγάλη αύξηση της θερμοκρασίας στο στρώμα του ωστικού κύματος (shock layer) στην περιοχή του σημείου αποκοπής. Πέραν του σημείου αποκοπής όπου το στρώμα του ωστικού κύματος εκτονώνεται η θερμοκρασία μικραίνει και έχουμε την ανάπτυξη ενός οριακού στρώματος του οποίου ο αριθμός Mach στο άκρο του είναι αρκετά μεγάλος.

Σαν αποτέλεσμα, η έντονη διάχυση δημιουργεί υψηλές θερμοκρασίες που έχουν σαν αποτέλεσμα την έναρξη χημικών αντιδράσεων. Όταν δε η θερμοκρασία είναι πολύ μεγάλη ($T > 9000 \text{ K}$) ο αέρας ιονίζεται και έχουμε ροή πλάσματος δηλαδή ιόντων NO^+ , O^+ , N^+ και ελεύθερων ηλεκτρονίων. Τα ελεύθερα ηλεκτρόνια αλληλεπιδρούν με τα ηλεκτρομαγνητικά πεδία συνεπώς και με τις συχνότητες τηλεπικοινωνιών (radio frequencies) και σαν αποτέλεσμα δημιουργείται απώλεια επικοινωνιών (communication blackout) από και προς το κινούμενο όχημα. Γι αυτό τον λόγο, στα διαστημικά οχήματα η επικοινωνία επιτυγχάνεται μέσω δορυφόρων και όλα τα σήματα κατευθύνονται πρώτα αντίθετα προς την κίνηση στο λιγότερο ιονισμένο μέρος της ροής προς τον δορυφόρο και από εκεί προς το έδαφος.



Μια άλλη εφαρμογή στην οποία έχουμε ροές μεγάλης θερμοκρασίας είναι οι συσκευές laser μεγάλης ισχύος (της τάξης των MWatt) που έχουν εφαρμογές στις συσκευές συγκόλλησης δεξ παρακάτω σχήμα.

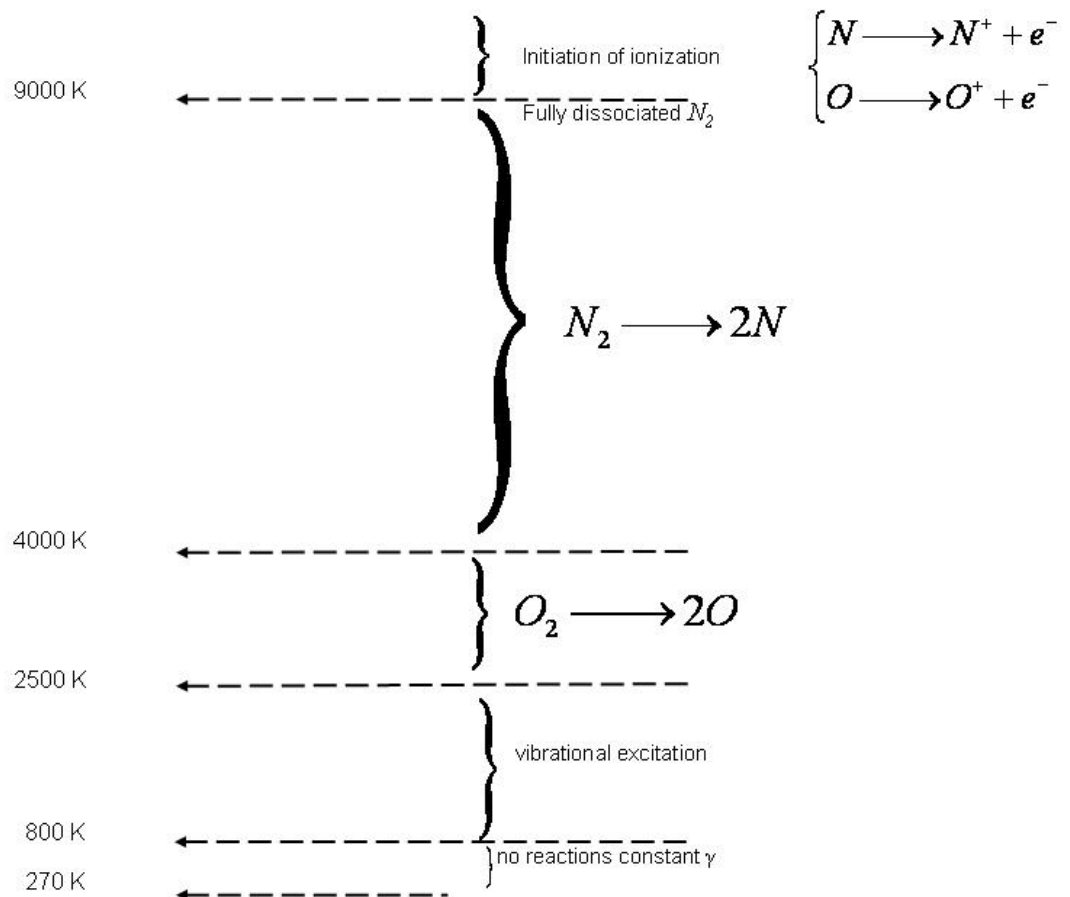


Λόγω της υψηλής θερμοκρασίας τα μόρια του μίγματος στο δοχείο πριν από το ακροφύσιο διεγείρονται σε ταλάντωση αλλά δεν υπάρχουν χημικές αντιδράσεις. Μετά την εκτόνωση του αερίου μίγματος δια μέσο του υπερηχητικού ακροφυσίου δημιουργείται laser η οποία κατευθύνεται κάθετα προς το επίπεδο του σχήματος από καθρέπτες που υπάρχουν στα τοιχώματα της κοιλότητας.

Οι κύριες διαφορές ροών υψηλής θερμοκρασίας από τις συνήθεις συμπιεστές ροές όπου η σταθερά των αερίων γ δεν μεταβάλλεται είναι οι ακόλουθες:

1. Διαφορές στις θερμοδυναμικές ιδιότητες e, h, p, T, ρ, s
2. Οι ιδιότητες μεταφοράς μ και κ είναι σημαντικά διαφοροποιημένες και επί πλέον υπάρχουν μηχανισμοί διάχυσης (συντελεστές διάχυσης $D_{i,j}$)
3. Μεγάλοι ρυθμοί μεταφοράς θερμότητας.
4. Ο λόγος ειδικών θερμοτήτων $\gamma = c_p / c_v$ δεν παραμένει σταθερός
5. Η ανάλυση γίνεται μόνο αριθμητικά διότι δεν μπορούμε να βρούμε αναλυτικές σχέσεις για μεταβλητό γ
6. Σε πολύ μεγάλες θερμοκρασίες (>9000 K) το αέριο είναι μερικώς ιονισμένο πλάσμα που έχει ηλεκτρική αγωγιμότητα και η παρουσία εξωτερικού ηλεκτρομαγνητικού πεδίου δημιουργεί δυνάμεις στο πλάσμα (Lorentz forces)
7. Υπάρχει ακτινοβολία από και προς το αέριο

Οι θερμοκρασίες για τις οποίες σημαντικές χημικές αντιδράσεις λαμβάνουν χώρα συνοψίζονται στο παρακάτω διάγραμμα



2. Μη συνεκτικές ροές υψηλής θερμοκρασίας

Η μελέτη και αριθμητική προσομοίωση συμπιεστών ροών συνήθως διεξάγεται για κατάσταση θερμοδυναμικής ισορροπίας. Σύμφωνα με την κλασσική θερμοδυναμική ένα σύστημα βρίσκεται σε κατάσταση θερμοδυναμικής ισορροπίας όταν επικρατεί θερμική ισορροπία, μηχανική και χημική ισορροπία, και δεν υπόκειται σε ακτινοβολία. Η θερμοδυναμική ισορροπία χαρακτηρίζεται από ελάχιστα των θερμοδυναμικών δυναμικών όπως η ελεύθερη ενέργεια Helmholtz $F = E - TS$ και η ελεύθερη ενέργεια Gibbs $G = H - TS$, που σημαίνει ότι (σύμφωνα και με τον δεύτερο νόμο της θερμοδυναμικής) η εντροπία του συστήματος θα αυξάνεται μέχρι να επιτευχθεί ισορροπία. Σε ροές υψηλή με θερμοκρασία μπορεί να υπάρξουν καταστάσεις διαταραγμένης θερμοδυναμικής ή /και χημικής ισορροπίας (local thermodynamic and chemical non-equilibrium) τις οποίες θα ορίσουμε στο πλαίσιο της στατιστικής θερμοδυναμικής παρακάτω.

Η ολική ενέργεια των μορίων αερίων απαρτίζεται από την ενέργεια μεταφοράς $e_{\text{trans}} = 3RT/2$, την ενέργεια περιστροφής $e_{\text{rot}} = RT$, την ενέργεια ταλάντωσης e_{vibr} , και την ηλεκτρονική ενέργεια e_{electr} . Υπό κανονικές συνθήκες πίεσης και θερμοκρασίας ο αέρας έχει ενέργεια μεταφοράς και περιστροφής ενώ όπως είδαμε και παραπάνω η ενέργεια ταλάντωσης των μορίων διεγείρεται σε μεγαλύτερες θερμοκρασίες και σε ακόμη πιο μεγάλες θερμοκρασίες αρχίζει η διάσπαση των μορίων του αέρα. Παρόμοια σε καύση με υψηλή θερμοκρασία η ενέργεια ταλάντωσης των μορίων διεγείρεται με την αύξηση της θερμοκρασίας.

Οι βαθμοί ελευθερίας των μορίων σε ταλάντωση και οι χημικές αντιδράσεις συμβαίνουν λόγω μοριακών συγκρούσεων ή /και λόγω της αλληλεπίδρασης με ακτινοβολία. Ένα μόριο, π.χ. το μόριο O_2 , πρέπει να υποστεί ένα σχετικά μεγάλο αριθμό συγκρούσεων, τυπικά της τάξης των 20000 πριν να ενεργοποιηθούν οι βαθμοί ελευθερίας σε ταλάντωση. Ο αριθμός συγκρούσεων στην πραγματικότητα εξαρτάται από την δομή του μορίου και την σχετική κινητική ενέργεια μεταξύ των μορίων που συγκρούονται (όσο πιο μεγάλη είναι η κινητική ενέργεια δηλαδή η θερμοκρασία) τόσο μικρότερος αριθμός συγκρούσεων απαιτείται για να διεγερθούν οι βαθμοί ελευθερίας του μορίου σε ταλάντωση. Όταν δε η θερμοκρασία αυξάνεται περαιτέρω το μόριο τελικά διασπάται, ο αριθμός των συγκρούσεων που απαιτείται για την διάσπαση είναι της τάξης των 200000. Ανεξάρτητα του αριθμού οι συγκρούσεις μεταξύ των μορίων έχουν σαν αποτέλεσμα την διέγερση των βαθμών ελευθερίας σε ταλάντωση και την έναρξη των χημικών αντιδράσεων. Αλλά λόγω του μεγάλου σχετικά αριθμού των συγκρούσεων που απαιτούνται για την διέγερση των βαθμών ελευθερίας του μορίου σε ταλάντωση και των χημικών αντιδράσεων παρέρχεται ορισμένος χρόνος ο οποίος είναι ανάλογος της συχνότητας σύγκρουσης Z που είναι ανάλογη της πίεσης $Z \propto p/\sqrt{T}$, που σημαίνει ότι ο απαιτούμενος χρόνος είναι μεγάλος όταν η πίεση είναι μικρή και η θερμοκρασία μεγάλη.

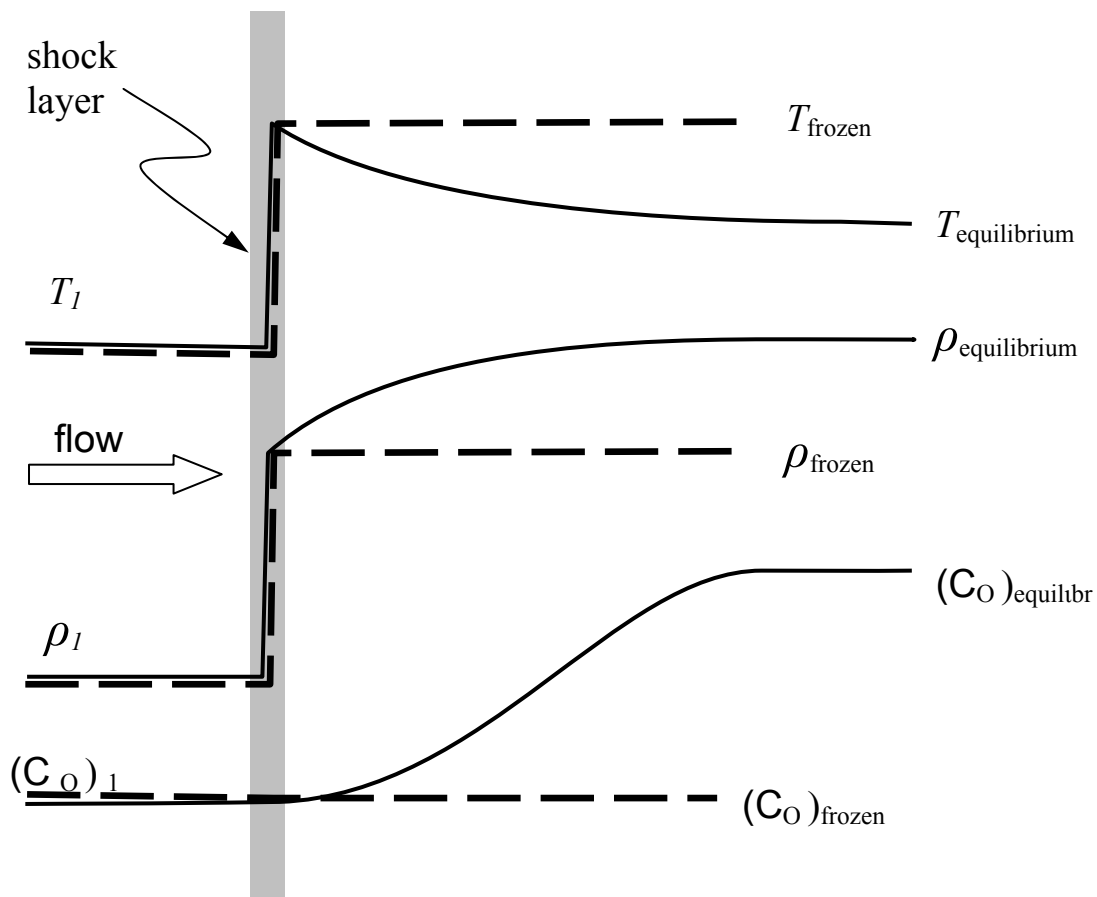
Τα συστήματα για τα οποία θεωρούμε ότι βρίσκονται σε κατάσταση ισορροπίας, έχουμε συνεπώς υποθέσει ότι στα μόρια του αέρα διατίθεται αρκετός χρόνος για να συμπληρωθεί ο απαιτούμενος αριθμός συγκρούσεων και ότι οι ιδιότητες του συστήματος είναι σταθερές και ανεξάρτητες του χρόνου για σταθερή πίεση και θερμοκρασία. Σε πολλά προβλήματα καύσης και ροής αερίων σε μεγάλες ταχύτητες (high-speed gas dynamics) δεν διατίθεται αρκετός χρόνος στο αέριο για να φθάσει στην κατάσταση ισορροπίας. Ένα τυπικό παράδειγμα είναι η ροή δια μέσου ενός ωστικού κύματος όπου η πίεση και η θερμοκρασία αυξάνονται γρήγορα καθώς τα μόρια διέρχονται δια μέσου του ωστικού κύματος. Σαν αποτέλεσμα οι κατάσταση

ισορροπίας σε ταλάντωση και χημική σύνθεση διαταράσσεται. Για να βρεθεί το μόριο σε μια νέα κατάσταση ισορροπίας απαιτεί κάποιος αριθμός συγκρούσεων, συνεπώς ορισμένος χρόνος. Αλλά λόγω της μεγάλης ταχύτητας, κατά τον χρόνο στον οποίο έχουν συμβεί αρκετές συγκρούσεις για να προσεγγισθεί μία νέα κατάσταση ισορροπίας το μόριο μετακινήθηκε μία ορισμένη απόσταση από το ωστικό κύμα, θα υπάρξει συνεπώς μία περιοχή αμέσως μετά το ωστικό κύμα όπου δεν έχουμε συνθήκες ισορροπίας.

Θεωρούμε ένα πεδίο ροής στο οποίο η θερμοκρασία και η πίεση μεταβάλλονται χωρικά και χρονικά. Ο μόνος τρόπος διατήρησης της ισορροπίας εσωτερικής ενέργειας και χημικής σύνθεσης τοπικά σε όλα τα στοιχεία του ρευστού που κινούνται κατά μήκος των γραμμών ροής είναι να έχουμε στιγμιαία ρύθμιση των τοπικών τιμών πίεσης και θερμοκρασίας έτσι ώστε να έχουμε άπειρα ταχείς ρυθμούς αντίδρασης ή μηδενικό χρόνο χαλάρωσης (zero relaxation time). Έστω ότι τ_f είναι ο χαρακτηριστικός χρόνος τον οποίο χρειάζεται ένας στοιχειώδης όγκος ρευστού για να διανύσει την χαρακτηριστική απόσταση ℓ μέσα στο πεδίο ροής $\tau_f \sim \ell/V_\infty$, και έστω ότι τ_c είναι ο χαρακτηριστικός χρόνος των χημικών αντιδράσεων για να αποκατασταθεί η ισορροπία. Τότε:

- i) Όταν, $\tau_f \gg \tau_c$ επιτυγχάνεται τοπική ισορροπία
- ii) Όταν, $\tau_f \ll \tau_c$ η ροή είναι σταθεροποιημένη (frozen flow)
- iii) Όταν $\tau_f \sim \tau_c$ η ροή είναι σε κατάσταση μη-ισορροπίας

Σύμφωνα με τους παραπάνω ορισμούς η ροή μέσα από ένα ισχυρό ωστικό κύμα έχει ποιοτικά τις μεταβολές που φαίνονται στο παρακάτω σχήμα.



Οι εξισώσεις που διέπουν την κίνηση μη-συνεκτικής ροής είναι οι εξισώσεις Euler

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{\mathbf{u}}) &= 0 \\ \rho \frac{D\bar{\mathbf{u}}}{Dt} &= -\nabla p \\ \rho \frac{Dh_o}{Dt} &= \frac{\partial p}{\partial t} + \dot{q}, \quad h_o = h + \frac{\mathbf{u}^2}{2}\end{aligned}\tag{1}$$

και ισχύουν για ροές σε κατάσταση ισορροπία όσο και για ροές σε κατάσταση εκτός ισορροπίας. Ο όρος \dot{q} στην εξίσωση ενέργειας δηλώνει την μεταβολή θερμότητας από ακτινοβολία και δεν έχει σχέση με την θερμότητα που εκλύεται ή απορροφάται από λόγω χημικών αντιδράσεων. Η ανταλλαγή ενέργειας λόγω χημικών αντιδράσεων ενσωματώνεται στην ενθαλπία με την μορφή θερμότητας σχηματισμού (heat of formation) διότι η ενθαλπία μίγματος j συστατικών δίνεται από την σχέση

$$\begin{aligned}h &= \underbrace{\sum_j \eta_j (H_j - (E_j)_0)}_{\text{sensible enthalpy}} + \underbrace{\sum_j \eta_j (\Delta H_f)_j^\circ}_{\text{effective zero-point energy}} \\ &= \underbrace{\sum_j c_j (h_j - (e_j)_0)}_{\text{sensible enthalpy}} + \sum_j c_j (\Delta h_f)_j^\circ \\ &= \underbrace{\sum_j c_j (h_j - (e_j)_0)}_{\text{sensible enthalpy}}\end{aligned}$$

obtained from statistical mech.

όπου $(E_j)_0$ ή $(e_j)_0$ δηλώνει την ενέργεια σε μηδενική θερμοκρασία, και δίνεται από την στατιστική μηχανική από

$$(H_j - (E_j)_0) = \frac{3}{2} \mathcal{R}T + \mathcal{R}T + \frac{h\nu/kT}{e^{h\nu/kT} - 1} \mathcal{R}T + \mathcal{R}T + (\text{electronic energy})$$

$c_j = \rho_j / \rho$, $\eta_j = c_j / \mathcal{M}_j$, και ο όρος $\sum_j \eta_j (\Delta H_f)_j^\circ = \sum_j c_j (\Delta h_f)_j^\circ$ αναφέρεται συχνά στην βιβλιογραφία ως χημική ενθαλπία (chemical enthalpy)

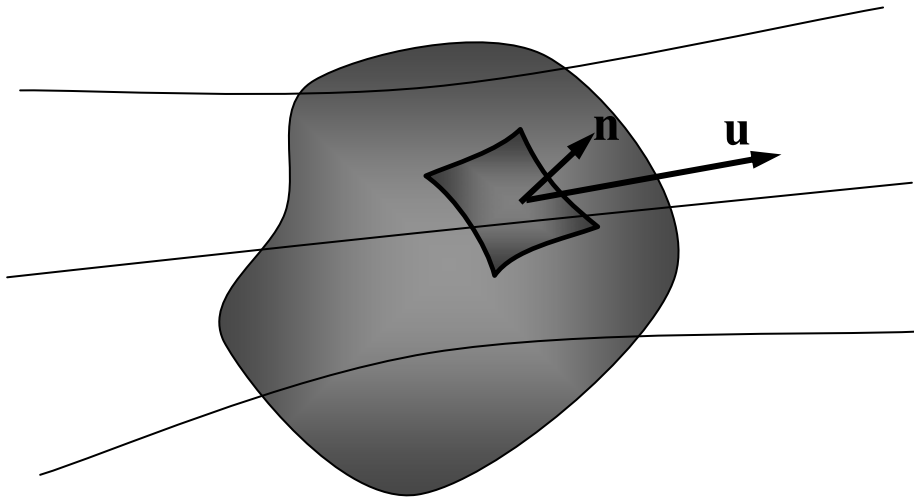
Για ροές εκτός κατάστασης ισορροπίας επιπρόσθετα από την παραπάνω εξίσωση συνέχειας $\partial \rho / \partial t + \nabla \cdot (\rho \bar{\mathbf{u}}) = 0$, την οποία από εδώ και στο εξής θα ονομάζουμε συνολική συνέχεια (global continuity) θα πρέπει να λάβουμε υπ όψη και τις εξισώσεις διατήρησης των συστατικών (species continuity equations) για κάθε συστατικό στοιχείο στο μίγμα.

Η εξίσωση διατήρησης συνέχειας των συστατικών βρίσκεται εάν θεωρούμε ένα σταθερό όγκο ελέγχου για ροή μη συνεκτική σε κατάσταση εκτός ισορροπίας με χημικές αντιδράσεις. Έστω ότι η μάζα του συστατικού j ανά μονάδα όγκου του μίγματος είναι ρ_j τότε

$$\rho = \sum_j \rho_j \quad (2)$$

Ο ρυθμός ροής του συστατικού j δια μέσου της στοιχειώδους επιφάνειας ds είναι $\rho_j \bar{\mathbf{u}} \cdot d\mathbf{s}$, όπου $\bar{\mathbf{u}}$ είναι η τοπική ταχύτητα. Η συνολική ροή μάζας του συστατικού j έξω από τον στοιχειώδη όγκο ελέγχου είναι

$$\oiint_S \rho_j \bar{\mathbf{u}} \cdot d\mathbf{s}$$



Ενώ η μάζα του συστατικού j μέσα στον στοιχειώδη όγκο ελέγχου είναι

$$\iiint_V \rho_j dV$$

Έστω ότι ο τοπικός ρυθμός μεταβολής της μάζας ανά μονάδα όγκου, ρ_j , του συστατικού j που συμβαίνει λόγω χημικών αντιδράσεων στον όγκο ελέγχου είναι \dot{w}_j . Ο συνολικός ρυθμός μεταβολής της μάζας μέσα στον όγκο ελέγχου προκαλείται από:

- i) Την ροή μάζας του συστατικού j δια μέσο της επιφάνειας του όγκου ελέγχου.
- ii) Την δημιουργία και καταστροφή συστατικού j μέσα στον όγκο ελέγχου χημικών αντιδράσεων
- iii)

Δηλαδή,

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_V \rho_j dV = -\oiint_S \rho_j \bar{\mathbf{u}} \cdot d\mathbf{s} + \iiint_V \dot{w}_j dV$$

από αυτό το ισοζύγιο και μετά την εφαρμογή του θεωρήματος της απόκλισης βρίσκουμε την διαφορική μορφή της εξίσωσης διατήρησης συστατικών

$$\frac{\partial \rho_j}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_j \bar{\mathbf{u}}) = \dot{w}_j \quad (3)$$

Εάν το ιξώδες της ροής δεν ήταν αμελητέο τότε θα είχαμε και έναν επί πλέον όρο διάχυσης όπως θα δούμε παρακάτω για τις συνεκτικές εξισώσεις κίνησης αερίων σε υψηλή θερμοκρασία με χημικές αντιδράσεις.

Οι ρυθμοί μεταβολής των συστατικών \dot{w}_j , $j=1,2,\dots,N$ βρίσκονται από τους ρυθμούς χημικής αντίδρασης π.χ.

$$\begin{aligned} \frac{d[NO]}{dt} = & -k_{f_1}[NO][O_2] + k_{b_1}[N][O][O_2] \\ & - k_{f_2}[NO][N_2] + k_{b_2}[N][O][N_2] \\ & \dots \dots \dots \end{aligned} \quad (4)$$

όπου ο δείκτης f και b δηλώνουν forward και backward αντιδράσεις, αντίστοιχα.

Οι διαστάσεις στην Εξ. (4) είναι moles/ μονάδα όγκου/ μονάδα χρόνου. Αλλά οι διαστάσεις του τοπικού ρυθμού μεταβολής της μάζας ανά μονάδα όγκου \dot{w}_{NO} στην Εξ. (3) είναι μάζα συστατικού ανά μονάδα όγκου και χρόνου. Από τον ορισμό του μοριακού βάρους για το συστατικό j έχουμε

$$\dot{w}_{NO} = M_{NO} \frac{d[NO]}{dt} \quad (5)$$

όπου M_{NO} στην Εξ. (5) είναι το μοριακό βάρος του NO . Συνεπώς η εξίσωση συνέχειας, Εξ. (3), για το συστατικό NO είναι

$$\frac{\partial \rho_j}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_j \bar{\mathbf{u}}) = M_{NO} \frac{d[NO]}{dt} \quad (6)$$

Ο ρυθμός αντίδρασης $d[NO]/dt$ βρίσκεται από την εξίσωση αντίδρασης, Εξ. (4), στην οποία οι σταθερές του ρυθμού χημικών αντιδράσεων $k_{f,b}$ υπολογίζονται από την εξίσωση Arrhenius

$$k_{f,b} = c_1 T^a e^{-\varepsilon_0/T} \quad (7)$$

όπου οι συντελεστές c_1 , a , ε_0 βρίσκονται από πειραματικές μετρήσεις.

Συνοψίζοντας, για την περιγραφή ενός χημικά αντιδρώντος μείγματος σε κατάσταση μη-ισορροπίας με N συστατικά έχουμε $N-1$ εξισώσεις συστατικών της μορφής της Εξ. (3) οι οποίες μαζί με την επιπρόσθετη εξίσωση

$$\rho = \sum_{j=1}^{j=N} \rho_j$$

Αποτελούν ένα σύστημα N εξισώσεων για την εύρεση της στιγμιαίας σύστασης του μείγματος των N χημικών συστατικών σε κατάσταση μη-ισορροπίας.

Συχνά οι εξισώσεις συνέχειας συστατικών εκφράζονται σε μορφή κλάσματος μάζας των συστατικών $c_j = \rho_j / \rho$, $\sum_j c_j = 1$ οπότε

$$\frac{\partial(\rho c_j)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho c_j \bar{\mathbf{u}}) = \dot{w}_j \quad (8)$$

Αναπτύσσοντας την Εξ. (8) βρίσκουμε

$$\rho \left[\frac{\partial c_j}{\partial t} + \bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla c_j \right] + c_j \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{\mathbf{u}}) \right] = \dot{w}_j$$

ο πρώτος όρος είναι η ολική παράγωγος οπότε

$$\frac{D c_j}{D t} = \frac{\dot{w}_j}{\rho} \quad (9)$$

η οποία μπορεί να εκφρασθεί σε λόγο mole/μάζα $\eta_j = c_j / \mathcal{M}_j$, $\sum_j \eta_j = 1$

$$\frac{D \eta_j}{D t} = \frac{\dot{w}_j}{\mathcal{M}_j \rho} \quad (10)$$

Η ολική παράγωγος εκφράζει τον ρυθμό μεταβολής της ποσότητας καθώς παρακολουθούμε την κίνηση ενός στοιχείου ρευστού που κινείται με την ροή. Συνεπώς στις Εξ. (9) και (10) καθώς ακολουθούμε την κίνηση ενός στοιχείου σταθερής μάζας που κινείται στο πεδίο ροής βλέπουμε ότι οι μεταβολές του κλάσματος μάζας των συστατικών c_j ή η_j (που είναι εκπεφρασμένα ανά μονάδα μάζας) προξενούνται μόνο από χημικές αντιδράσεις που λαμβάνουν χώρα μέσα στον στοιχειώδη όγκο. Αντιθέτως, η ολική παράγωγος της πυκνότητας των συστατικών που είναι εκπεφρασμένη ανά μονάδα όγκου δίνεται από την σχέση

$$\frac{D \rho_j}{D t} = \dot{w}_j - \rho_j (\nabla \cdot \bar{\mathbf{u}}) \quad (11)$$

όπου ο επί πλέον όρος $\rho_j (\nabla \cdot \bar{\mathbf{u}})$ εκφράζει την μεταβολή του ειδικού όγκου διότι ο όρος $(\nabla \cdot \bar{\mathbf{u}})$ εκφράζει την μεταβολή του όγκου του στοιχείου του ρευστού ανά μονάδα όγκου.

Με την αύξηση της θερμοκρασίας και την παρουσία χημικών πρέπει να λάβουμε υπ όψη την επί πλέον ενέργεια λόγω της διέγερσης των βαθμών ταλάντωσης στα μόρια (vibrational energy). Ο ρυθμός μεταβολής της ενέργειας ταλάντωσης των μορίων e_{vib} ισούται με τον ρυθμό ανταλλαγής μοριακής ενέργειας μέσα στο στοιχείο του ρευστού, δηλαδή

$$\frac{D e_{vib}}{D t} = \frac{1}{\tau} (e_{vib}^{eq} - e_{vib}) \quad (12)$$

όπου τ είναι ο χαρακτηριστικός χρόνος χαλάρωσης (relaxation time), ο οποίος δίδεται από την σχέση

$$\tau = \left[k_{0,1} \left(1 - e^{-h\nu/kT} \right) \right]^{-1}$$

στην οποία $k_{1,0}$ είναι η σταθερά ρυθμού μετάβασης (rate constant of transition), h είναι η σταθερά του Planck ($h = 6.62606 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s} = 4.13566 \times 10^{-5} \text{ eV} \cdot \text{s}$), k είναι η σταθερά του Boltzmann $k = 1.38065 \times 10^{-23} \text{ J/K} = 8.61734 \times 10^{-5} \text{ eV/K}$, και ν είναι η χαρακτηριστική συχνότητα ταλάντωσης του μορίου (fundamental vibrational frequency). Επί πλέον στην Εξ. (12) e_{vib}^{eq} είναι η ενέργεια ταλάντωσης ισορροπίας που δίνεται από την σχέση της στατιστικής μηχανικής

$$e_{vib}^{eq} = \frac{h\nu/kT}{e^{h\nu/kT} - 1} RT \quad (13)$$

και e_{vib} είναι η ενέργεια ταλάντωσης σε κατάσταση μη-ισορροπίας.

Το σύστημα των εξισώσεων για μη συνεκτική ροή με χημικές αντιδράσεις συμπληρώνεται με την εξίσωση κατάστασης

$$p = \rho RT, \quad R = \mathcal{R} / \mathcal{M}, \quad \mathcal{M} = \left[\sum_{j=1}^N \frac{c_j}{\mathcal{M}_j} \right]^{-1} \quad (14)$$

Όπως αναφέρθηκε αρχικά η ενθαλπία του μίγματος δίνεται από την σχέση

$$h = \sum_j c_j h_j \quad (15)$$

ενώ η ενθαλπία του κάθε συστατικού υπολογίζεται ως

$$h_j = (e_{\text{trans}} + e_{\text{rot}} + e_{\text{vibr}} + e_{\text{electronic}}) + R_j T + (\Delta h_f)_j \quad (16)$$

Τα κλάσματα μάζας των συστατικών $c_j = \rho_j / \rho$ στην Εξ. (8) υπολογίζονται από τις εξισώσεις συνέχειας των συστατικών Εξ. (8).

Είναι επίσης γνωστό από την στατιστική μηχανική ότι απαιτούνται πολύ πιο λίγες συγκρούσεις μεταξύ των μορίων για την ανταλλαγή της ενέργειας ταλάντωσης παρά για την έναρξη χημικών αντιδράσεων. Σε μερικές περιπτώσεις η συχνότητα των μοριακών συγκρούσεων είναι αρκετά μεγάλη για να επιτρέπει να υποθέσουμε συνθήκες κοντά στην κατάσταση ισορροπίας για την ενέργεια ταλάντωσης, αλλά δεν είναι αρκετά μεγάλη για να υποθέσουμε ότι υπάρχει και χημική ισορροπία τότε η ενέργεια ταλάντωσης βρίσκεται από

$$e_{vib} = e_{vib}^{eq} = \frac{h\nu/kT}{e^{h\nu/kT} - 1} RT \quad (17)$$

Στις περιπτώσεις όμως που έχουμε ροή εκτός θερμοδυναμικής και χημικής ισορροπίας η ενέργεια ταλάντωσης των συστατικών υπολογίζεται από την εξίσωση ρυθμού μεταβολής της ενέργειας ταλάντωσης

$$\frac{Dc_j e_{vib}}{Dt} = \frac{c_j}{\tau} (e_{vib}^{eq} - e_{vib}) \quad (18)$$

3. Εξισώσεις κίνησης συνεκτικής ροής με χημικές αντιδράσεις

Οι εξισώσεις που διέπουν την κίνηση συνεκτικής ροής με χημικές αντιδράσεις έχουν εφαρμογή σε ροές πολύ μεγάλων ταχυτήτων και στην καύση. Οι εξίσωση συνέχειας και ορμής είναι καθαρά μηχανικής μορφής και παραμένουν αμετάβλητες

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V}) = 0 \quad (18)$$

$$\begin{aligned} \rho \frac{Du}{Dt} &= -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \\ \rho \frac{Dv}{Dt} &= -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} \\ \rho \frac{Dw}{Dt} &= -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} \end{aligned} \quad (19)$$

Η εξίσωση ενέργειας τροποποιείται ως ακολούθως για να περιλάβει την διάχυση

$$\begin{aligned} \rho \frac{D(e + \mathbf{V}^2/2)}{Dt} &= -\nabla \cdot \mathbf{q} - \nabla \cdot p\mathbf{V} + \frac{\partial(u\tau_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial(u\tau_{yx})}{\partial y} + \frac{\partial(u\tau_{zx})}{\partial z} \\ &\quad + \frac{\partial(v\tau_{xy})}{\partial x} + \frac{\partial(v\tau_{yy})}{\partial y} + \frac{\partial(v\tau_{zy})}{\partial z} \\ &\quad + \frac{\partial(w\tau_{xz})}{\partial x} + \frac{\partial(w\tau_{yz})}{\partial y} + \frac{\partial(w\tau_{zz})}{\partial z} \end{aligned} \quad (20)$$

Το διάνυσμα θερμικής ροής δίδεται από

$$\mathbf{q} = -k\nabla T + \sum_{j=1}^N \rho_j \mathbf{U}_j h_j + \mathbf{q}_R \quad (21)$$

όπου \mathbf{U}_j είναι οι ταχύτητες διάχυσης.

Η εσωτερική ενέργεια στην Εξ. (19) είναι $e = \sum_j c_j e_j$, $c_j = \rho_j / \rho$ και οι εσωτερική ενέργεια των συστατικών είναι

$$e_j = \frac{5}{2} RT + e_{vib_j} + e_{el} + (\Delta h_f)_j^0 \quad (22)$$

όπου για τοπική θερμοδυναμική ισορροπία δι-ατομικών μορίων

$$e_{vib_j}^{eq} = \frac{h\nu_j/kT}{e^{h\nu_j/kT} - 1} RT \quad (23)$$

ενώ όταν έχουμε κατάσταση μη ισορροπίας σε ταλάντωση e_{vib_j} στην Εξ. (22) είναι

$$\frac{D(c_j e_{vib_j})}{Dt} + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot (\rho_j \mathbf{U}_j c_j e_{vib_j}) = \frac{c_j}{\tau} (e_{vib_j}^{eq} - e_{vib_j}) \quad (24)$$

Παρατηρούμε ότι στην εξίσωση μεταβολής της ενέργειας ταλάντωσης για συνεκτική ροή περιλαμβάνεται ο επιπρόσθετος όρος της διάχυσης διότι καθώς τα στοιχεία του ρευστού κινούνται η ενέργεια ταλάντωσης $c_j e_{vib_j}$ ανά μονάδα μάζας του μείγματος που οφείλεται στο συστατικό j μεταβάλλεται όχι μόνο λόγω του πεπερασμένου ρυθμού χαλάρωσης σε ταλάντωση (finite rate vibrational relaxation) αλλά και λόγω της διάχυσης του συστατικού j μέσα ή έξω από το την στοιχειώδη επιφάνεια που περικλείει την ενέργεια ταλάντωσης.

Αντί της εξίσωσης κατάστασης για ροές με χημικές αντιδράσεις σε τοπική ισορροπία έχουμε επί πλέον τις εξισώσεις θερμοδυναμικών ιδιοτήτων

$$\begin{aligned} p &= p(e, \rho) \\ T &= T(e, \rho) \end{aligned} \quad (25)$$

Για την περιγραφή ροών με χημικές αντιδράσεις σε κατάσταση μη-ισορροπίας απαιτούνται επί πλέον οι εξισώσεις συνέχειας των συστατικών οι οποίες όπως δείξαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο έχουν την μορφή

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_V \rho_j dV = - \iint_S \rho_j \mathbf{V}_j d\mathbf{S} + \iiint_V \dot{w}_j dV \quad (26)$$

όπου όμως για την συνεκτική ροή οι ταχύτητες κίνησης των συστατικών \mathbf{V}_j δεν είναι σταθερές αλλά το άθροισμα της ταχύτητας ροής και της ταχύτητας διάχυσης για το κάθε συστατικό $\mathbf{V}_j = \mathbf{V} + \mathbf{U}_j$. Η διαφορική μορφή της διατήρησης μάζας συστατικών είναι

$$\frac{\partial \rho_j}{\partial t} + \nabla \cdot [\rho_j (\mathbf{V} + \mathbf{U}_j)] = \dot{w}_j \quad (27)$$

αντικαθιστώντας $\rho_j = c_j \rho$ και λαμβάνοντας υπ' όψη την εξίσωση συνέχεις για όλο το μίγμα Εξ. (18) βρίσκουμε

$$\rho \left(\frac{\partial c_j}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla c_j \right) = \rho \frac{Dc_j}{Dt} = \dot{w}_j - \nabla \cdot (\rho_j \mathbf{U}_j) \quad (28)$$

Σύμφωνα με το νόμο διάχυσης του Fick έχουμε $\mathbf{j}_j = \rho_j \mathbf{U}_j = -\rho \mathcal{D}_{j_{mix}} \nabla c_j$ όπου $\mathcal{D}_{j_{mix}}$ είναι ο συντελεστής διάχυσης μίγματος πολλών συστατικών και συνδέεται με τον συντελεστή διάχυσης συστατικού j στο συστατικό k \mathcal{D}_{jk} ως $\mathcal{D}_{j_{mix}} = (1 - X_j) / \sum_k X_j / \mathcal{D}_{jk}$

Μετά την αντικατάσταση των ταχυτήτων διάχυσης από τον νόμο του Fick στις εξισώσεις διατήρησης συστατικών, Εξ. (28), οι απαραίτητες $n-1$ εξισώσεις συνέχειας των συστατικών (διότι $\sum_j c_j = 1$) είναι

$$\rho \frac{Dc_j}{Dt} = \dot{w}_j + \nabla \cdot (\rho \mathcal{D}_{j\text{mix}} \nabla c_j) \quad (29)$$

2.2 Εναλλακτικές μορφές των εξισώσεων

Η εξίσωση ενέργειας μπορεί να γραφεί ως προς την ολική ενθαλπία $h_0 = h + \mathbf{V}^2/2$, διότι σύμφωνα με το ορισμό της ενθαλπίας $h = e + p/\rho$ έχουμε

$$\begin{aligned} \frac{De}{Dt} &= \frac{Dh}{Dt} - \frac{1}{\rho} \frac{Dp}{Dt} + \frac{p}{\rho^2} \frac{D\rho}{Dt} \\ &= \frac{Dh}{Dt} - \frac{1}{\rho} \frac{Dp}{Dt} + \frac{p}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{V} \end{aligned} \quad (30)$$

και

$$\rho \frac{De}{Dt} = \rho \frac{Dh}{Dt} - \frac{\partial p}{\partial t} - \nabla \cdot (p\mathbf{V}) \quad (31)$$

οπότε

$$\begin{aligned} \rho \frac{Dh_0}{Dt} &= \frac{\partial p}{\partial t} - \nabla \cdot \mathbf{q} - \nabla \cdot p\mathbf{V} + \frac{\partial(u\tau_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial(u\tau_{yx})}{\partial y} + \frac{\partial(u\tau_{zx})}{\partial z} \\ &\quad + \frac{\partial(v\tau_{xy})}{\partial x} + \frac{\partial(v\tau_{yy})}{\partial y} + \frac{\partial(v\tau_{zy})}{\partial z} \\ &\quad + \frac{\partial(w\tau_{xz})}{\partial x} + \frac{\partial(w\tau_{yz})}{\partial y} + \frac{\partial(w\tau_{zz})}{\partial z} \end{aligned} \quad (32)$$

Πολλαπλασιάζοντας τις εξισώσεις ορμής με τις ταχύτητες και αφαιρώντας από την Εξ. (32) βρίσκουμε την εξίσωση διατήρησης της ενθαλπίας

$$\rho \frac{Dh_0}{Dt} = \frac{Dp}{Dt} - \nabla \cdot \mathbf{q} + \Phi \quad (33)$$

όπου ο όρος Φ ονομάζεται συνάρτηση διάχυσης και δίνεται από

$$\Phi = \tau_{xx} \frac{\partial u}{\partial x} + \tau_{yy} \frac{\partial v}{\partial y} + \tau_{zz} \frac{\partial w}{\partial z} + \tau_{xy} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \tau_{xz} \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) + \tau_{yz} \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right)$$

Όλες οι μορφές της εξίσωσης ενέργειας Εξς. (2.3), (2.13) και (2.14) δεν περιλαμβάνουν σε ρητή μορφή όρους ανταλλαγής ενέργειας λόγω των χημικών αντιδράσεων διότι η ενέργεια e η ενθαλπία h και η ολική ενθαλπία h_0 περιλαμβάνουν την ενέργεια μηδενικού σημείου (zero-point energy) με την μορφή θερμότητας σχηματισμού (heat of formation $(\Delta h_f)_j^0$) του συστατικού j δηλαδή e , h , και h_0 είναι απόλυτες τιμές των μεγεθών αυτών. Η ενθαλπία h του μίγματος είναι άθροισμα των ενθαλπιών των συστατικών h_j και δίνεται από την σχέση

$$\begin{aligned} h &= \sum_j c_j h_j = \sum_j c_j \left((h_j)_{sens} + (\Delta h_f)_j^0 \right) \\ h_j &= \underbrace{\frac{7}{2} RT + e_{vib} + e_{el}}_{(h_j)_{sens}} + (\Delta h_f)_j^0 \end{aligned} \quad (34)$$

όπου $(h_j)_{sens}$ είναι η ενθαλπία που μετρείται άνω του σημείου μηδενικής ενέργειας (zero-point energy) η οποία όταν υπάρχει θερμοδυναμική ισορροπία είναι

$$(h_j)_{sens} = \int_0^T (c_p)_j dT \quad (35)$$

Αντικαθιστώντας την ενθαλπία ως $h = h_{sens} + \sum_j c_j (\Delta h_f)_j^0$ έχουμε

$$\frac{Dh}{Dt} = \frac{Dh_{sens}}{Dt} + \sum_j \frac{Dc_j}{Dt} (\Delta h_f)_j^0 \quad (36)$$

οπότε η εξίσωση ενθαλπίας είναι

$$\rho \frac{Dh_{sens}}{Dt} = \nabla \cdot (kT) - \nabla \cdot \sum_j \rho_j \mathbf{U}_j (h_j)_{sens} - \nabla \cdot \mathbf{q}_R + \frac{Dp}{Dt} + \Phi - \sum_j \dot{w}_j (\Delta h_f)_j^0 \quad (37)$$

Συχνά χρησιμοποιείται η ακόλουθη συντηρητική μορφή της εξίσωσης ενέργειας

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \nabla \cdot ((E + p)\mathbf{u}) = \nabla \cdot (\vec{\tau} \mathbf{u}) - \nabla \cdot (\bar{\mathbf{q}}_t + \bar{\mathbf{q}}_r + \bar{\mathbf{q}}_v) - \nabla \cdot \sum_{s=1}^{N_s} \rho_s h_s \bar{\mathbf{v}}_s^d \quad (38)$$

όπου $\bar{\mathbf{q}}_t$, $\bar{\mathbf{q}}_r$, $\bar{\mathbf{q}}_v$ δηλώνουν την ροή θερμότητας λόγω μεταφοράς (translational), περιστροφής (rotational), και ενέργειας ταλάντωσης (vibrational), και h_s είναι η ολική ενθαλπία ανά μονάδα μάζας του συστατικού s . Η παραπάνω μορφή της εξίσωσης ενέργειας απλοποιείται υποθέτοντας ότι η ενέργεια ταλάντωσης (vibrational energy) διατομικών μορίων περιγράφεται από θερμοκρασία ταλάντωσης. Στην περίπτωση αυτή, προκύπτει μόνο μια εξίσωση για την ενέργεια ταλάντωσης ανά μονάδα όγκου the following equation for the vibrational energy per unit volume E_v αντί για πολλαπλές εξισώσεις για κάθε συστατικό.

$$\frac{\partial E_v}{\partial t} + \nabla \cdot (E_v \bar{\mathbf{u}}) = -\nabla \cdot \bar{\mathbf{q}}_v - \nabla \cdot \sum_{s=1}^{N_s} \rho_s e_{v_s} \bar{\mathbf{v}}_s + w_v$$

όπου e_{v_s} είναι η ενέργεια ταλάντωσης ανά μονάδα μάζας του συστατικού s και ο όρος πηγής (vibrational energy source term w_v) μοντελοποιείται.

Χρησιμοποιώντας την παραπάνω μορφή της εξίσωσης ενέργειας το σύστημα συμπληρώνεται με την εξίσωση κατάστασης

$$E = \frac{1}{2} \rho |\bar{\mathbf{u}}|^2 + \sum_{s=1}^{N_s} \rho_s C_{v_s} T + \sum_{s=1}^{N_s} \rho_s e_{v_s} + \sum_{s=1}^{N_s} h_s^o e_{v_s}$$

όπου C_{v_s} είναι η ειδική θερμότητα υπό σταθερό όγκο (translational-rotational) για το συστατικό s , και h_s^o είναι η ενθαλπία σχηματισμού το συστατικού s . Η θερμοδυναμική πίεση συνδέεται με τις μεταφορικές και περιστροφικές θερμοκρασίες μέσω του νόμου του Dalton των μερικών πιέσεων των συστατικών για ιδανικό

$$p = \sum_{s=1}^{N_s} p_s = \sum_{s=1}^{N_s} \rho_s \frac{R}{M_s} T = \rho \bar{R} T, \quad \bar{R} = \sum_{s=1}^{N_s} \frac{\rho_s}{\rho} \frac{R}{M_s}$$

Ενώ η ενθαλπία ανά μονάδα μάζας του συστατικού s ορίζεται ως

$$h_s = C_{v_s} T + p_s / \rho_s + e_{v_s} + h_s^o .$$

Σύμφωνα με τους παραπάνω ορισμούς η πίεση μπορεί να υπολογισθεί μόνο από τις συντηρητικές μεταβλητές ως ακολούθως

$$p = \frac{\sum_{s=1}^{N_s} \rho_s \frac{R}{M_s}}{\sum_{s=1}^{N_s} \rho_s C_{v_s}} \left[E - \frac{1}{2} \frac{(\rho u)^2 + (\rho v)^2 + (\rho w)^2}{\sum_{s=1}^{N_s} \rho_s} - E_v - \sum_{s=1}^{N_s} \rho_s h_s^o \right]$$

Η συντηρητική μορφή των εξισώσεων που περιγράφουν ροή με χημικές αντιδράσεις είναι

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot \bar{\mathbf{F}} = \mathbf{W}$$

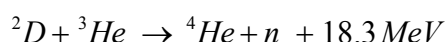
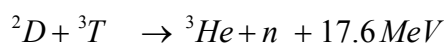
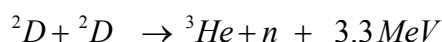
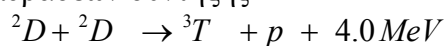
όπου \mathbf{U} , υποδηλώνει το διάνυσμα κατάστασης των αγνώστων, \mathbf{F}^{inv} είναι το μη-συνεκτικό διάνυσμα ροής, \mathbf{F}^{vis} είναι το συνεκτικό διάνυσμα ροής, και \mathbf{W} είναι ο όρος πηγής. Η αναπτυγμένη μορφή των εξισώσεων στις δύο διαστάσεις είναι

$$U = \begin{Bmatrix} \rho_1 \\ \rho_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \rho_{N_s} \\ \rho u \\ \rho v \\ E_v \\ E \end{Bmatrix}, \quad \mathbf{F}_x^{\text{inv}} = \begin{Bmatrix} \rho_1 u \\ \rho_2 u \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \rho_{N_s} u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ E_v u \\ (E + p)u \end{Bmatrix}, \quad \mathbf{F}_x^{\text{vis}} = \begin{Bmatrix} \rho_1 u_1^d \\ \rho_2 u_2^d \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \rho_{N_s} u_{N_s}^d \\ -\tau_{xx} \\ -\tau_{xy} \\ q_{v_x} + \sum_{s=1}^{N_s} (\rho_s e_{vs} u_s^d) \\ q_x + q_{v_x} - (\vec{\tau} \cdot \vec{u}) + \sum_{s=1}^{N_s} (\rho_s h_v u_s^d) \end{Bmatrix}, \quad W = \begin{Bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ w_{N_s} \\ 0 \\ 0 \\ w_v \\ 0 \end{Bmatrix}$$

Παρ' όλες τις απλοποιήσεις οι εξισώσεις ροή με χημικές αντιδράσεις περιέχουν πού περισσότερους όρους και η αριθμητική τους επίλυση συνεπάγεται μεγάλη αύξηση του υπολογιστικού κόστους.

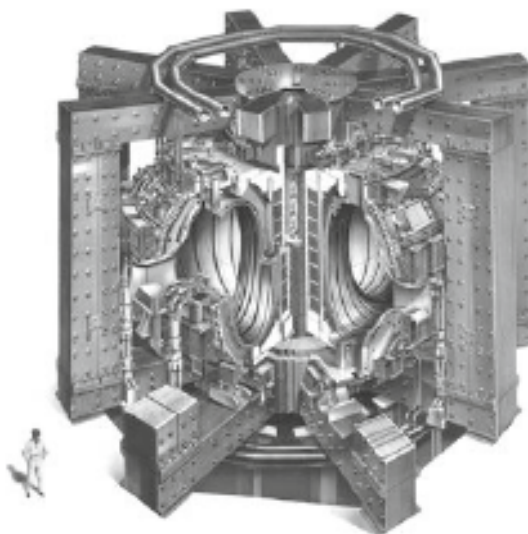
Ροές αερίων σε εξαιρετικά υψηλές θερμοκρασίες (hot plasma flows)

Η ελεγχόμενη πυρηνική σύντηξη (controlled nuclear fusion) υπόσχεται μία ανεξάντλητη πηγή ενέργειας η οποία μπορεί να επιλύσει τις ολοένα αυξανόμενες ανάγκες σε ενέργεια στον 21^ο αιώνα και στο απώτερο μέλλον. Ο κοινός στόχος της επικεντρωμένης έρευνας που διεξάγεται σε διεθνές επίπεδο είναι η χρήση της ενέργειας που παράγεται από την σύντηξη των πυρήνων των ισοτόπων του υδρογόνου δευτερίου (D) και τριτίου (T) για την λειτουργία ενός σταθμού παραγωγής ενέργειας. Η εκμετάλλευση των αντιδράσεων σύντηξης

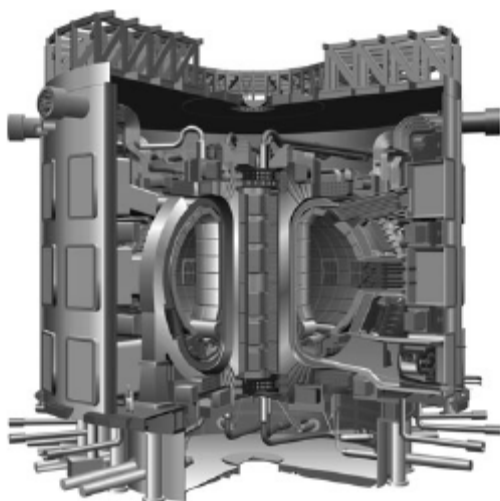


είναι δυνατή μόνο όταν η κινητική ενέργεια των συστατικών σύντηξης είναι μεγάλη ώστε να είναι δυνατόν να υπερνικηθεί η δύναμη Coulomb μεταξύ των πυρήνων που έχουν ομόσημο φορτίο. Σαν αποτέλεσμα οι αντιδράσεις πυρηνικής σύντηξης λαμβάνουν χώρα όταν η ενέργεια είναι μεταξύ 10 και 100 keV (όπου 1 eV είναι η κινητική ενέργεια που αποκτά ένα ηλεκτρόνιο όταν επιταχύνεται από ηλεκτρικό δυναμικό ενός volt, $1 \text{ eV} = 1.602 \times 10^{-19} \text{ J}$ συχνά δε το eV ανάγεται σε μονάδες θερμοκρασίας, $1 \text{ eV} / k_B = 1.602 \times 10^{-19} \text{ J} / 1.380 \times 10^{-23} \text{ J} / \text{K} = 11604 \text{ K}$).

Μια διάταξη με την οποία μπορεί να πραγματοποιηθεί η εκμετάλλευση της ενέργειας σύντηξης είναι η διάταξη tokamak (αρχικά προερχόμενο από την σύντμηση **токамак**, an acronym of either "тороидальная камера с магнитными катушками" toroidal chamber with magnetic coils, or "тороидальная камера с аксиальным магнитным полем" toroidal chamber with axial magnetic field). Η διάταξη tokamak περιέχει πλάσμα D – T πολύ μεγάλης θερμοκρασίας (περίπου $1.5 \times 10^6 \text{ K}$ που είναι συγκρίσιμη με την θερμοκρασία που επικρατεί στο κέντρο του Ήλιου) και η εκμετάλλευση της ενέργειας σύντηξης καθίσταται δυνατή όταν επιτύχουμε να περιορίσουμε τα σωματίδια μεγάλης κινητικής ενέργειας για αρκετά μεγάλο χρόνο. Ο περιορισμός της εξαιρετικά υψηλής θερμοκρασίας δέσμης πλάσματος στην διάταξη tokamak επιτυγχάνεται με μαγνητικά. Μία τομή tokamak φαίνεται στο παρακάτω σχήμα.



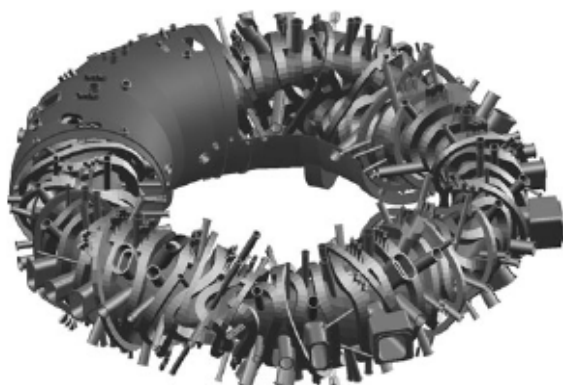
Η χρήση του tokamak σαν σταθμού παραγωγής ενέργειας αποτελεί σήμερα ένα φιλόδοξο στόχο και απαιτεί μεγάλη χρηματοδότηση που μπορεί να επιτευχθεί μόνο σε διεθνές επίπεδο. Η προσπάθεια δημιουργίας ενός τέτοιας κλίμακας θερμοπυρηνικού αντιδραστήρα (ITER, *International Thermonuclear Experimental Reactor*) άρχισε το 1992 και διεξάγεται σήμερα με την διεθνή συνεργασία και συν-χρηματοδότηση της Ευρώπης, ΗΠΑ, Ρωσίας, Κίνας, Ιαπωνίας και Ν. Κορέας. Ο πειραματικός θερμοπυρηνικός αντιδραστήρας ITER φαίνεται στο παρακάτω σχήμα και κατασκευάζεται σήμερα στο Cadarache της νοτίου Γαλλίας.



Ακτίνα	10.7 m
Ύψος	30.0 m
Διάμετρος πλάσματος	6.2 m
Όγκος πλάσματος	840 m ³
Μαγνητικό πεδίο	5.3 T
Ρεύμα πλάσματος	15 MA
Ισχύς σύντηξης	500MW
θερμοκρασία πλάσματος	2x10 ⁸ K
Χρόνος λειτουργίας	> 400 s

International Thermonuclear Experimental Reactor (ITER) αντιδραστήρας με συνολικό ύψος 30 m θα είναι τρεις φορές μεγαλύτερος από τον μεγαλύτερο προϋπάρχοντα αντιδραστήρα.

Μία ακόμη διάταξη που διερευνάται πειραματικά για την εκμετάλλευση της ενέργεια σύντηξης είναι η διάταξη stellarator που απεικονίζεται στο παρακάτω σχήμα και έχει διαφορετική αρχή λειτουργίας από την διάταξη tokamak που χρησιμοποιείται στην κατασκευή του πειραματικού αντιδραστήρα ITER



Διάμετρος πλάσματος	5.5 m
Όγκος πλάσματος	30 m ³
Μαγνητικό πεδίο	3.0 T
Ισχύς σύντηξης	15 MW
θερμοκρασία πλάσματος	<10 ⁸ K
Χρόνος λειτουργίας	30 min

Η μελέτη των ιδιαίτερων χαρακτηριστικών του πεδίου ροής θερμού πλάσματος με την επίρεια ισχυρών μαγνητικών πεδίων βασίζεται στις εξισώσεις μαγνητο-υδροδυναμικής (magnetohydrodynamics MHD) και των εξισώσεων Vlasov που θα αναφέρουμε παρακάτω.

Εξισώσεις MHD

Οι εξισώσεις της μαγνητοδυναμικής (MHD) προέρχονται από την σύζευξη των εξισώσεων συμπίεστης ροής με τις εξισώσεις ηλεκτρικού πεδίου (Maxwell equations). Οι εξισώσεις του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου είναι ο νόμος του Ampere και ο νόμος του Faraday είναι

$$\begin{aligned}\nabla \times \mathbf{H} &= \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \\ \nabla \times \mathbf{E} &= -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}\end{aligned}$$

υπόκεινται στους περιορισμούς $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ και $\nabla \cdot \mathbf{D} = q$, το ρεύμα δίνεται από τον νόμο του Ohm $\mathbf{J} = \sigma(\mathbf{E} + \mathbf{u} \times \mathbf{B})$ και επί πλέον ισχύουν οι καταστατικοί νόμοι $\mathbf{B} = \mu_m \mathbf{H}$, $\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E}$, $\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}$, όπου ε είναι η διηλεκτρική σταθερά, σ είναι η ηλεκτρική αγωγιμότητα και μ_m είναι η μαγνητική διαπερατότητα.

Αμελώντας το ρεύμα επαγωγής $\partial \mathbf{D} / \partial t \equiv 0$ και υποθέτοντας ότι $\varepsilon \omega / \sigma \ll 1$ (όπου ω είναι μία χαρακτηριστική συχνότητα) και ότι $|\mathbf{u}| / c \ll 1$ μπορούμε να συνδέσουμε το διάνυσμα μαγνητικού πεδίου με την ταχύτητα ροής με την εξίσωση επαγωγής

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \otimes \mathbf{B} - \mathbf{B} \otimes \mathbf{u}) + \nabla \times \left[\frac{1}{\sigma} \left(\nabla \times \frac{\mathbf{B}}{\mu_m} \right) \right] = 0$$

Οι εξισώσεις ροής εμπλέκονται με το μαγνητικό πεδίο δια μέσου της δύναμης Lorentz και προσθέτοντας το έργο από το μαγνητικό πεδίο στην εξίσωση ενέργειας.

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) &= 0 \\ \frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + p \mathbf{I}) &= \mathbf{J} \times \mathbf{B} \\ \frac{\partial e}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\left[\left(e + \frac{\mathbf{B}^2}{2} \right) + p \right] \mathbf{u} \right) &= \mathbf{J} \cdot (\mathbf{B} \times \mathbf{u}) \\ \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \otimes \mathbf{B} - \mathbf{B} \otimes \mathbf{u}) &= -\mathbf{u} (\nabla \cdot \mathbf{B})\end{aligned}$$

Η συντηρητική μορφή των εξισώσεων MHD για μη συνεκτική ροή είναι

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ e \\ B_x \\ B_y \\ B_z \end{pmatrix} + \mathbf{div} \begin{pmatrix} \rho \mathbf{u} \\ \rho \mathbf{u} \mathbf{u}^T + \left(p + \frac{|\mathbf{B}|^2}{2} \right) \mathbf{I} - \mathbf{B} \mathbf{B}^T \\ \mathbf{u} \left(e + p + \frac{|\mathbf{B}|^2}{2} \right) - \mathbf{B} (\mathbf{u}^T \mathbf{B}) \\ \mathbf{u} \mathbf{B}^T - \mathbf{B} \mathbf{u}^T \end{pmatrix} = 0,$$

και υπόκεινται στον περιορισμό $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ τον οποίο πρέπει να ικανοποιεί η αριθμητική λύση σε κάθε χρονικό βήμα. Ένας τρόπος για να ικανοποιήσουμε αυτόν τον περιορισμό είναι να επιλύσουμε την εξίσωση Poisson $\nabla^2 \phi + \nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ για την βαθμωτή συνάρτηση ϕ και κατόπιν να διορθώσουμε το μαγνητικό πεδίο $\mathbf{B}^c = \mathbf{B} + \nabla \phi$. Μία πιο εύκολη αντιμετώπιση του προβλήματος διατήρησης μηδενικής απόκλισης του μαγνητικού πεδίου είναι η χρήση όρων πηγής

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ e \\ B_x \\ B_y \\ B_z \end{pmatrix} + \text{div} \begin{pmatrix} \rho \mathbf{u} \\ \rho \mathbf{u} \mathbf{u}^T + (p + \frac{|\mathbf{B}|^2}{2}) \mathbf{I} - \mathbf{B} \mathbf{B}^T \\ \mathbf{u} (e + p + \frac{|\mathbf{B}|^2}{2}) - \mathbf{B} (\mathbf{u}^T \mathbf{B}) \\ \mathbf{u} \mathbf{B}^T - \mathbf{B} \mathbf{u}^T \end{pmatrix} = -(\nabla \cdot \mathbf{B}) \begin{pmatrix} 0 \\ B_x \\ B_y \\ B_z \\ \mathbf{u}^T \mathbf{B} \\ u \\ v \\ w \end{pmatrix} = -(\nabla \cdot \mathbf{B}) \left\{ \begin{matrix} 0 \\ \mathbf{B} \\ \mathbf{u} \cdot \mathbf{B} \\ \mathbf{u} \end{matrix} \right\} = \mathbf{S}_B$$

Η συντηρητική και αδιάστατη μορφή των εξισώσεων MHD για συνεκτική ροή είναι

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial y} + \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial z} = \frac{\partial \mathbf{F}_v}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{G}_v}{\partial y} + \frac{\partial \mathbf{H}_v}{\partial z} + \mathbf{S}_B$$

όπου

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ \rho W \\ B_x \\ B_y \\ B_z \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F} = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p^* - R_b \frac{B_x^2}{\mu_m} \\ \rho u v - R_b B_y \frac{B_x^2}{\mu_m} \\ \rho u w - R_b B_z \frac{B_x^2}{\mu_m} \\ (\rho W + p^*) u - \frac{R_b}{\mu_m} (\mathbf{u} \cdot \mathbf{B}) B_x \\ 0 \\ u B_y - v B_x \\ u B_z - w B_x \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}_v = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{\tau_{xx}}{\text{Re}} \\ \frac{\tau_{xy}}{\text{Re}} \\ \frac{\tau_{xz}}{\text{Re}} \\ F_E \\ 0 \\ \frac{1}{\text{Re}_\sigma} \frac{1}{\sigma} \left(\frac{\partial B_x}{\partial x \mu_m} - \frac{\partial B_y}{\partial y \mu_m} \right) \\ \frac{1}{\text{Re}_\sigma} \frac{1}{\sigma} \left(\frac{\partial B_z}{\partial x \mu_m} - \frac{\partial B_x}{\partial z \mu_m} \right) \end{pmatrix}$$

με αντίστοιχους ορισμούς για τα διανύσματα των μη-ιξωδών ροών \mathbf{G} , \mathbf{H} , και των ιξωδών διανυσμάτων ροών \mathbf{G}_v , \mathbf{H}_v και

$$W = e + \frac{\mathbf{B} \cdot \mathbf{B}}{2 \rho \mu_m} \quad e = \frac{p}{\gamma - 1} + \frac{1}{2} \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{u},$$

και p^* υποδηλώνει την ολική πίεση (θερμοδυναμική+μαγνητική) $p^* = p + \frac{\mathbf{B}^2}{2\mu_m}$

Ο όρος F_E είναι

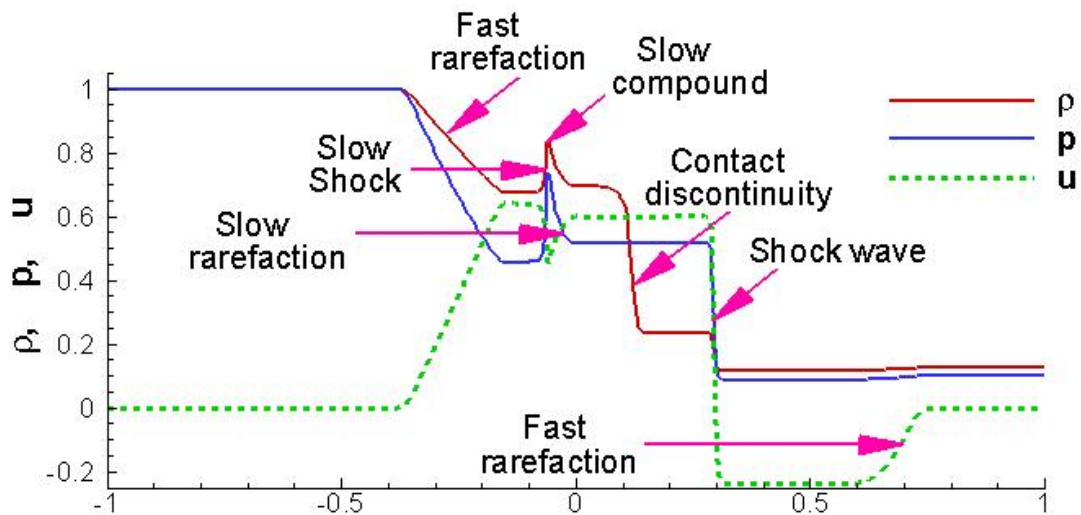
$$F_E = \frac{1}{\text{Re}}(u\tau_{xx} + v\tau_{xy} + w\tau_{xz}) + \frac{1}{(\gamma-1)\text{Pr}M^2\text{Re}} \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{\text{Re}_b}{\text{Re}_\sigma} \left\{ \frac{B_y}{\mu_m \sigma} \left(\frac{\partial B_y}{\partial x} \mu_m - \frac{\partial B_x}{\partial y} \mu_m \right) + \frac{B_z}{\mu_m \sigma} \left(\frac{\partial B_z}{\partial x} \mu_m - \frac{\partial B_x}{\partial y} \mu_m \right) \right\}$$

όπου R_b είναι ο αριθμός μαγνητικής δύναμης (magnetic force number) και Re_σ είναι ο μαγνητικός αριθμός Reynolds που δίδονται από

$$R_b = \frac{\mathbf{B}_{ref}^2}{\rho_{ref} \mu_{mref} \mathbf{u}^2} \text{ magnetic force}$$

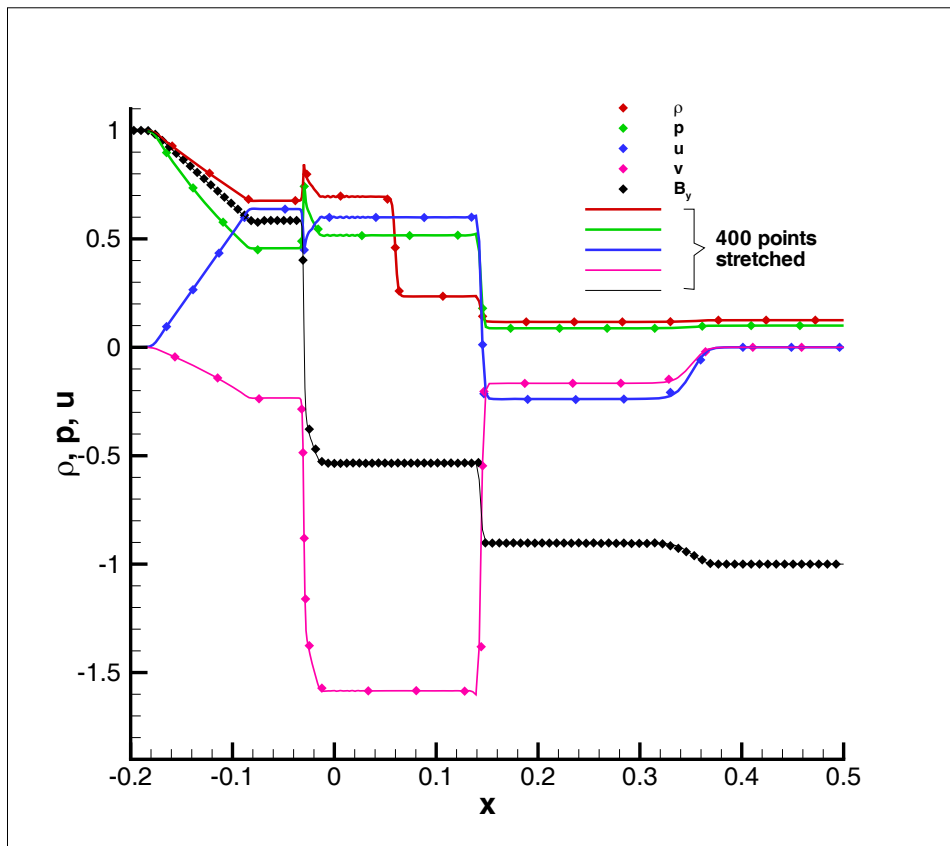
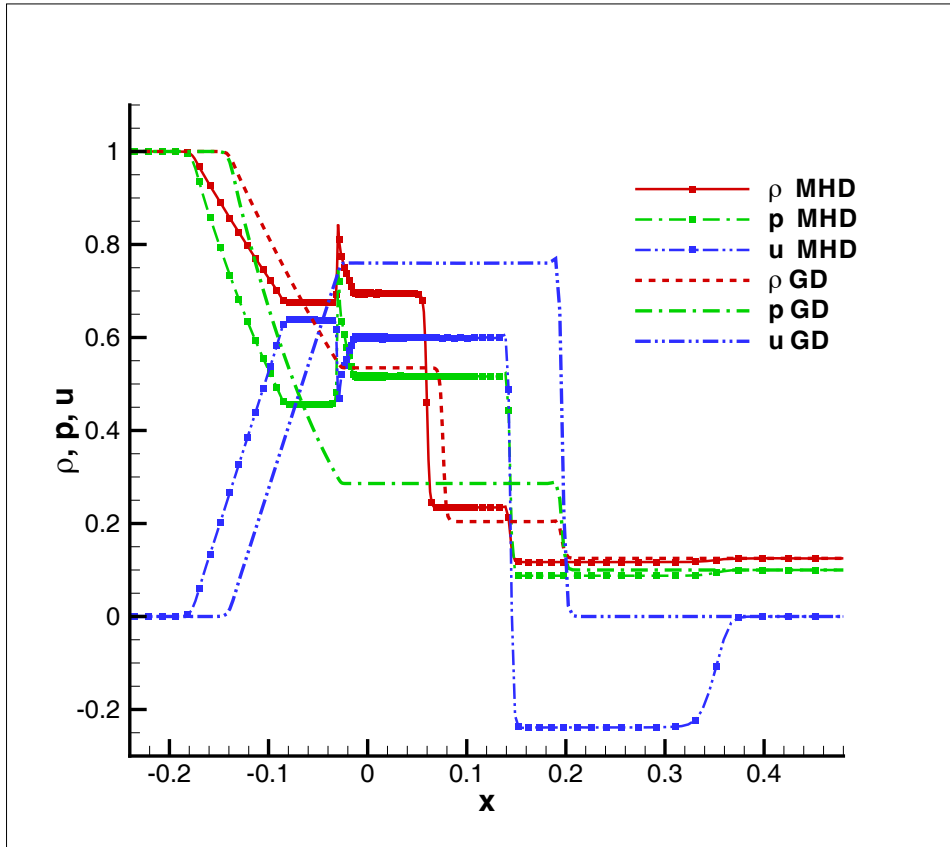
$$\text{Re}_\sigma = \frac{LU_{ref}}{\rho_{ref} \mu_{mref}} \text{ magnetic Reynolds}$$

Οι εξισώσεις MHD έχουν μεγαλύτερο υπολογιστικό κόστος από τις εξισώσεις συμπιεστή ροής και απαιτούν την χρήση μεθόδων (πεπερασμένων διαφορών, πεπερασμένων όγκων ή πεπερασμένων στοιχείων) μεγάλης τάξης ακρίβειας και δυνατότητας διάκρισης ασυνεχών ροής διότι περιέχουν φαινόμενα διάδοσης κυμάτων πολύ πιο περίπλοκα από την απλή συμπιεστή ροή όπως φαίνεται στο παρακάτω σχήμα

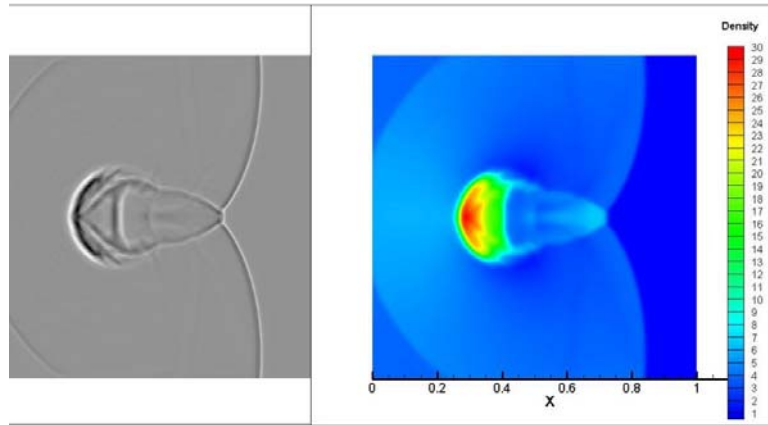


στο οποίο δείχνεται η αριθμητική επίλυση του προβλήματος ωστικού σωλήνα υπό την επήρεια μαγνητικού πεδίου

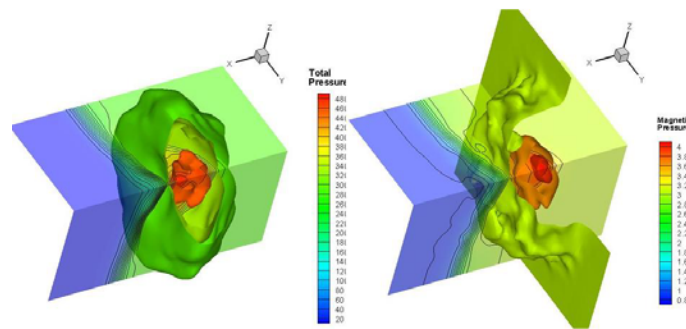
Οι σημαντικές διαφοροποιήσεις από την ροή χωρίς μαγνητικό πεδίο (GD) από την ροή με μαγνητικό πεδίο (MHD) τονίζονται στα παρακάτω σχήματα.



Οι παρακάτω αριθμητικές επιλύσεις των εξισώσεων MHD αφορούν εφαρμογές της αστροφυσικής όπου ιονισμένα αέρια (πλάσμα) βρίσκονται υπό την επίδραση μαγνητικών πεδίων.



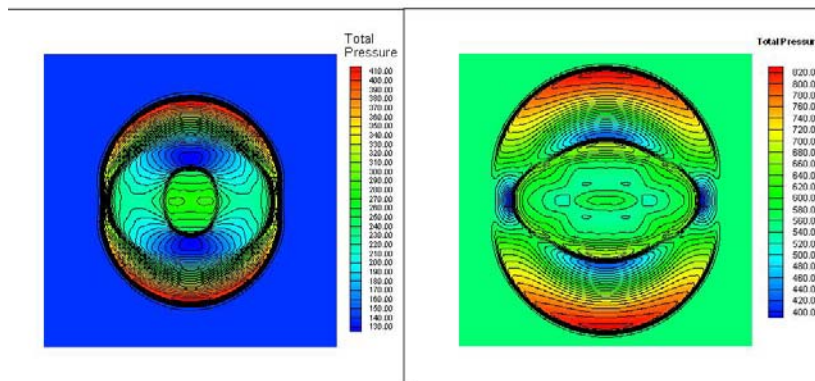
3D Magnetic Cloud



Application to MHD Blast Waves

$$B_x(\mathbf{x}, t=0) = \frac{50}{\sqrt{4\pi}}$$

$$B_x(\mathbf{x}, t=0) = \frac{100}{\sqrt{4\pi}}$$



Οι εξισώσεις Vlasov

Για τις εξαιρετικά υψηλές θερμοκρασίες που επικρατούν σε διατάξεις tokamak με εφαρμογές στην πυρηνική σύντηξη η κίνηση του πλάσματος περιγράφεται από την εξίσωση Vlasov οι οποίες εμπλέκουν την εξίσωση Boltzmann χωρίς όρο συγκρούσεων (collisionless Boltzmann equation)

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{u} \frac{\partial f}{\partial \vec{x}} + \frac{\vec{F}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{u}} = 0$$

με τις εξισώσεις ηλεκτρομαγνητικού πεδίου για τις συναρτήσεις κατανομής των ηλεκτρονίων $f_e(\vec{r}, \vec{p}, t)$ και ιόντων $f_i(\vec{r}, \vec{p}, t)$, όπου \vec{r} υποδηλώνει την θέση και \vec{p} την ορμή ως εξής

$$\frac{\partial f_e}{\partial t} + \vec{u}_e \nabla f_e - e \left(\vec{E} + \frac{1}{c} (\vec{u} \times \vec{B}) \right) \cdot \frac{\partial f_e}{\partial \vec{p}} = 0$$

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \vec{u}_i \nabla f_i - e \left(\vec{E} + \frac{1}{c} (\vec{u} \times \vec{B}) \right) \cdot \frac{\partial f_i}{\partial \vec{p}} = 0$$

$$\nabla \times \vec{B} = \frac{1}{c} \left[4\pi \vec{j} + \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \right]$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$$

όπου e είναι το φορτίο ηλεκτρονίων, c είναι η ταχύτητα του φωτός.

Οι εξισώσεις Vlasov υπόκεινται στους περιορισμούς $\nabla \cdot \vec{E} = 4\pi\rho$, $\nabla \cdot \vec{B} = 0$ και το φορτίο και το ρεύμα βρίσκονται από

$$\rho = e \int (f_i - f_e) d^3 \vec{p}$$

$$\vec{j} = e \int (f_i - f_e) \vec{u} d^3 \vec{p}$$

με συνθήκη συμβατότητας $\partial\rho / \partial t + \nabla \cdot \vec{j} = 0$ και η ταχύτητα ηλεκτρονίων ή ιόντων είναι

$$\vec{u}_e = \frac{\vec{p} / m_e}{\sqrt{1 + \left(\frac{p}{m_e c} \right)^2}}$$

Οι εξισώσεις Vlasov είναι εξαιρετικά δαπανηρές στην αριθμητική τους επίλυση και απαιτούν χρήση μεθόδων μεγάλης διακριτικής ικανότητας (high resolution numerical schemes)