ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3

ΟΙ ΕΞΙΣΩΣΕΙΣ ΔΙΑΤΗΡΗΣΗΣ ΓΙΑ ΠΟΛΥΣΥΣΤΑΤΙΚΑ ΑΝΤΙΔΡΩΝΤΑ ΣΥΣΤΗΜΑΤΑ

3.1 Ο ορισμός των ροών μάζας των διαφόρων συστατικών

Η συγκέντρωση των διαφόρων συστατικών σε ένα πολυσυστατικό σύστημα μπορεί να εκφραστεί μέσω διαφόρων τρόπων, όπως (Bird, Stewart and Lightfoot (1960), Kuo (1986))

- συγκέντρωση μάζας (πυκνότητα), ρ_i , που είναι ο αριθμός των moles του συστατικού i ανά μονάδα όγκου
- κλάσμα μάζας, $Y_i = \rho_i / \rho$, όπου ρ είναι η πυκνότητα του συνολικού μίγματος
- κλάσμα moles, $X_i = C_i / C$, όπου C η μοριακή πυκνότης του συνολικού μίγματος

Τα διάφορα συστατικά σε ένα διαχεόμενο μίγμα κινούνται με διαφορετικές ταχύτητες v_i σε σχέση με ένα ακίνητο σύστημα αναφοράς. Για ένα μίγμα n_i συστατικών η τοπική μαζικά μέση (mass average) ταχύτητα v δίδεται (Kuo, 1986):

$$v = \frac{\sum_{i \approx 1}^{N} \rho_i v_i}{\sum_{i \approx 1}^{N} \rho_i} \tag{3.1}$$

Παρόμοια η τοπική μοριακά μέση (molar average) ταχύτητα v^* ορίζεται ως:

$$v^* = \frac{\sum_{i \approx 1}^{N} C_i v_i}{\sum_{i \approx 1}^{N} C_i} \tag{3.2}$$

Σε ροϊκά σύστημα συχνά χρησιμοποιούμε τις σχετικές ταχύτητες διάχυσης:

την ταχύτητα μαζικής διάχυσης $$V_i = v_i - v \tag{3.3}$$

και την ταχύτητα μοριακής διάχυσης $$V_i^* = v_i - v^* \tag{3.4}$$

Αυτές οι ταχύτητες διάχυσης υποδηλώνουν την κίνηση του i συστατικού σε σχέση με την κίνηση του ρευστού μίγματος. Η μαζική (ή μοριακή) ροή (mass ή molar flux) του συστατικού i είναι μια διανυσματική ποσότητα που υποδηλώνει τη μάζα (ή τον αριθμό moles) του συστατικού i που περνά μέσω της μονάδας επιφάνειας στη μονάδα του χρόνου. Έτσι οι μαζικές και μοριακές ροές σε σχέση με σταθερές συντεταγμένες είναι:

μαζική ροή

$$\overset{*}{m}_i = \rho_i \; v_i \tag{3.5}$$

μοριακή ροή

$$\overset{*}{n}_i = C_i \; v_i \tag{3.6}$$

Οι σχετικές μαζικές και μοριακές ροές ορίζονται ως :

$$J_i = \rho_i (v_i - v) = \rho_i V_i \tag{3.7}$$

$$J_i^* = C_i (v_i - v^*) = C_i V_i^* \tag{3.8}$$

3.2 Ο νόμος διάχυσης του Fick

Η μαζική διαχυτότης $D_{AB} = D_{BA}$ σε ένα δυαδικό σύστημα ορίζεται μέσω της εξίσωσης:

$$J_A^* = - C \, D_{AB} \; \nabla X_A \tag{3.9}$$

Αυτός είναι ο πρώτος νόμος διάχυσης του Fick εκπεφρασμένος συναρτήσει της μοριακής διάχυσης J_A^*. Αυτή η εξίσωση δηλώνει ότι ένα συστατικό A διαχέεται (κινείται σε σχέση με το μίγμα) στην διεύθυνση κατά την οποία το κλάσμα moles του A ελαττώνεται ακριβώς όπως στην αγωγή η θερμότα ρέει προς την διεύθυνση της ελαττούμενης θερμοκρασίας. Οι μονάδες του D_{AB} είναι m^2 /s.

Η μοριακή ροή σε σχέση με σταθερές συντεταγμένες ορίζεται ως:

$$\overset{*}{n}_A = C_A \, v^* - C \, D_{AB} \; \nabla X_A \tag{3.10}$$

Αυτή η εξίσωση δείχνει ότι η ροή διάχυσης $\overset{*}{n}_A$ σε σχέση με σταθερές συντεταγμένες είναι το αποτέλεσμα δυο ανυσματικών ποσοτήτων: της μοριακής ροής του A που προέρχεται από την ολική κίνηση του ρευστού και το άνυσμα J_A^* που είναι η μοριακή ροή του A που προέρχεται από την διάχυση που υπερτίθεται στην συνολική ροή. Ανάλογα, συναρτήσει της μαζικής ροής ο πρώτος νόμος του Fick δίδει:

$$J_A = - \rho D_{AB} \nabla Y_A \tag{3.11}$$

Η μαζική ροή του Α σε σχέση με σταθερές συντεταγμένες είναι:

$$\overset{*}{m}_A = \rho_A \nu - \rho D_{AB} \nabla Y_A \tag{3.12}$$

Η ομοιότης μεταξύ μεταφοράς μάζας, ορμής και ενέργειας στην y διεύθυνση ενός δυαδικού συστήματος φαίνεται κάτωθι:

$$\begin{aligned} &\text{Νόμος του Fick} && J_{Ay} = - D_{AB} \frac{\partial}{\partial y}(\rho_A) \\ &\text{Νόμος του Newton} && \tau_{xy} = - \nu \frac{\partial}{\partial y}(\rho \upsilon_x) \qquad (3.13) \\ &\text{Νόμος του Fourier} && q_y = - \alpha \frac{\partial}{\partial y}(\rho C_p T) \end{aligned}$$

Η μαζική διαχυτότητα D_{AB} για δυαδικά μίγματα αερίων μπορεί να υπολογισθεί από την κινητική θεωρία των αερίων. Για ένα καθαρό αέριο που περιέχει δυο μοριακά συστατικά Α και Β με μάζες m_A, m_B και διαμέτρους μορίων d_A , d_B δίδεται από τον τύπο(Kuo, 1986, Kanury, 1975):

$$D_{AB} = \frac{2}{3}\left(\frac{K^3}{\pi^3}\right)^{1/2} \left(\frac{1}{2m_A} + \frac{1}{2m_B}\right)^{1/2} \frac{T^{3/2}}{p\left(\frac{d_A \mp d_B}{2}\right)^2} \tag{3.14}$$

όπου K η σταθερά Boltzman = R_u/σταθερά Avogadro και T είναι η θερμοκρασία.

<u>3.3 Η εξίσωση της συνέχειας</u>

Για ένα δυαδικό μίγμα η εξίσωση της συνέχειας για το συνολικό μίγμα και για κάθε ένα από τα συστατικά του Α και Β δίδεται παρακάτω:

- για το συστατικό Α :

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} + \left(\frac{\partial \overset{*}{m}_{Ax}}{\partial x} + \frac{\partial \overset{*}{m}_{Ay}}{\partial y} + \frac{\partial \overset{*}{m}_{Az}}{\partial z}\right) = \omega_A \tag{3.15}$$

και σε διανυσματική μορφή :

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} + (\nabla * \overset{*}{m}_A) = \omega_A \tag{3.16}$$

- για το συστατικό Β :

$$\frac{\partial \rho_B}{\partial t} + (\nabla * \overset{*}{m}_B) = \omega_B \tag{3.17}$$

Εδώ οι ποσότητες $\overset{*}{m}_{Ax}$ $\overset{*}{m}_{Ay}$ $\overset{*}{m}_{Az}$ είναι οι κάθετες συνιστώσες του ανύσματος ροής μάζας $\overset{*}{m}_A$, ω_A είναι ο ρυθμός παραγωγής ή κατανάλωσης του Α ή Β μέσω χημικών αντιδράσεων (kg/m^3s).

Η εξίσωση συνέχειας του συνολικού μίγματος ευρίσκεται προσθέτοντας τις εξισώσεις (3.16) και (3.17) και παίρνουμε:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + (\nabla \cdot \rho\, v) = 0 \tag{3.18}$$

Χρησιμοποιωντας τις σχεσεις $\overset{*}{m}_A + \overset{*}{m}_B = \rho\, v$ και τον νομο διατηρησης της μαζας $\Omega_A + \Omega_B = 0$ οι παραπανω εξισωσεις μπορουν να γραφουν συναρτησει μοριακων μοναδων για τις μοριακές μάζες. Εάν Ω_A, Ω_B είναι οι μοριακοί ρυθμοί απορρόφησης των Α και Β ανά μονάδα όγκου τότε έχουμε:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial t} \cdot \overset{*}{n}_A = \Omega_A \tag{3.19}$$

Αντικαθιστώντας την εξίσωση (3.12) στην εξίσωση (3.16) λαμβάνουμε:

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} + \nabla \cdot \rho_A\, v = \nabla \cdot \rho\, D_{AB} \nabla\, Y_A + \omega_A \tag{3.20}$$

Αντικαθιστώντας την εξίσωση (3.10) στην εξίσωση (3.19) λαμβάνουμε:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + \nabla \cdot C_A\, v^* = \nabla \cdot C\, D_{AB} \nabla\, X_A + \Omega_A \tag{3.21}$$

Εάν δεν έχουμε χημική αντίδραση τα ω, Ω είναι μηδέν. Εάν ακόμα το ν είναι μηδέν στην εξίσωση (3.20) ή το ν^* είναι μηδέν στην εξίσωση (3.21) λαμβάνουμε:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = D_{AB} \nabla^2 C_A \qquad (3.22)$$

που καλείται ο δεύτερος νόμος διάχυσης του Fick. Αυτή η εξίσωση είναι χρήσιμη για διάχυση σε στερεά ή στάσιμα ρευστά και για ισομοριακή διάχυση σε αέρια. Είναι όμοια με την εξίσωση αγωγής θερμότητας:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \nabla^2 T \qquad (3.23)$$

Για πολυσυστατικά συστήματα η εξίσωση (3.16) (χρησιμοποιώντας τις σχέσεις $\rho_i = Y_i \rho$ και $\nu_i = \nu + V_i$ γίνεται:

$$\frac{\partial Y_i \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho Y_i (\nu + V_i) = \omega_i \qquad (3.24)$$

ή

$$\rho \frac{\partial Y_i}{\partial t} + Y_i \frac{\partial \rho}{\partial t} + Y_i \nabla \cdot (\rho \nu) + \rho \nu \cdot \nabla Y_i + \nabla \cdot \rho Y_i V_i = \omega_i \qquad (3.25)$$

Από την εξίσωση συνέχειας έχουμε:

$$Y_i \frac{\partial \rho}{\partial t} + Y_i \nabla \cdot \rho \nu = 0$$

και έτσι η εξίσωση (3.24) γράφεται:

$$\frac{\partial Y_i}{\partial t} + \nu \cdot \nabla Y_i + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \rho Y_i V_i = \frac{\omega_i}{\rho} \qquad i = 1,2\ldots\ldots\ldots,N \qquad (3.26)$$

Η πρόσθεση των N αυτών εξισώσεων δίνει την εξίσωση της συνέχειας του συνολικού μίγματος. Από αυτές μόνο οι N-1 είναι ανεξάρτητες εξισώσεις. Στον πίνακα 3.1 παρατίθενται οι αναλυτικές μορφές των εξισώσεων συνέχειας (Kuo, 1986).

ΠΙΝΑΚΑΣ 3.1 Οι εξισώσεις της συνέχειας
Μίγματος

Καρτεσιανές συντεταγμένες (x, y, z):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u_x) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho u_y) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho u_z) = 0$$

Κυλινδρικές συντεταγμένες (r, θ, z): [α]

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(\rho r u_x) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta}(\rho u_\theta) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho u_z) = 0$$

Συστατικών

Καρτεσιανές συντεταγμένες (x, y, z):

$$\rho\left(\frac{\partial Y_i}{\partial t} + u_x\frac{\partial Y_i}{\partial x} + u_y\frac{\partial Y_i}{\partial y} + u_z\frac{\partial Y_i}{\partial z}\right)$$

$$+ \frac{\partial}{\partial x}(\rho Y_i V_{ix}) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho Y_i V_{iy}) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho Y_i V_{iz}) = \omega_i$$

[όπου

$$V_{ix} = -\frac{D}{Y_i}\frac{\partial Y_i}{\partial x}, \quad V_{iy} = -\frac{D}{Y_i}\frac{\partial Y_i}{\partial y}, \quad \text{and} \quad V_{iz} = -\frac{D}{Y_i}\frac{\partial Y_i}{\partial z} \;]$$

Κυλινδρικές συντεταγμένες (r, θ, z):

$$\rho\left(\frac{\partial Y_i}{\partial t} + u_r\frac{\partial Y_i}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r}\frac{\partial Y_i}{\partial \theta} + u_z\frac{\partial Y_i}{\partial z}\right)$$

$$+ \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\rho Y_i V_{ir}) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta}(\rho Y_i V_{i\theta}) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho Y_i V_{iz}) = \omega_i$$

[όπου

$$V_{ir} = -\frac{D}{Y_i}\frac{\partial Y_i}{\partial r}, \quad V_{i\theta} = -\frac{D}{Y_i r}\frac{\partial Y_i}{\partial \theta}, \quad \text{and} \quad V_{iz} = -\frac{D}{Y_i}\frac{\partial Y_i}{\partial z} \;]$$

3.4 Εξισώσεις Navier–Stokes

Σε αυτό το τμήμα θα παραθέσουμε σε πίνακες τις μερικές διαφορικές εξισώσεις που εκφράζουν την διατήρηση της ορμής και της ενέργειας για ένα συνεχές, ισοτροπικό και ομοιογενές μέσο.

3.4.1 Εξισώσεις διατήρησης της ορμής

Οι εξισώσεις διατήρησης της ορμής συναρτήσει του τανυστή των τάσεων και συναρτήσει των βαθμίδων ταχύτητας για ρ και μ σταθερά δίδονται στον πίνακα 3.2. Τα B_i είναι πεδιακές δυνάμεις (π.χ. λόγω βαρύτητας) ανα μονάδα όγκου. Σε ένα μίγμα N συστατικών οι πεδιακές δυνάμεις που επενεργούν σε κάθε ένα από τα συστατικά μπορεί να είναι διαφορετικές. Συνεπώς για ένα πολυσυστατικό σύστημα η πεδιακή δύναμη στην i διεύθυνση δίδεται από την εξίσωση :

$$B_i = \rho \sum_{k \approx 1}^{N} (Y_k f_k)_i \tag{3.27}$$

Όπου f_k είναι η δύναμη ανα μονάδα μάζας που επενεργεί επί του k συστατικού.

Πίνακας 3.2 Οι εξισώσεις Navier-Stokes σε καρτεσιανές συντεταγμένες (x,y,z)

Συναρτήσει του τανυστή τάσεων:

x – συνιστώσα, $\rho \left(\frac{\partial u_x}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_x}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_x}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_x}{\partial z} \right)$

$$= - \frac{\partial p}{\partial x} + \left(\frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \right) + \rho B_x$$

y – συνιστώσα, $\rho \left(\frac{\partial u_y}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_y}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_y}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_y}{\partial z} \right)$

$$= - \frac{\partial p}{\partial y} + \left(\frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} \right) + \rho B_y$$

z – συνιστώσα, $\rho \left(\frac{\partial u_z}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_z}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_z}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} \right)$

$$= - \frac{\partial p}{\partial z} + \left(\frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} \right) + \rho B_z$$

Συναρτήσει βαθμίδων

x – συνιστώσα, $\rho \left(\frac{\partial u_x}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_x}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_x}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_x}{\partial z} \right)$

$$= - \frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2} \right) + \rho B_x$$

y – συνιστώσα, $\rho \left(\frac{\partial u_y}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_y}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_y}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_y}{\partial z} \right)$

$$= - \frac{\partial p}{\partial y} + \mu \left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial z^2} \right) + \rho B_y$$

z – συνιστώσα, $\rho \left(\frac{\partial u_z}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_z}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_z}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} \right)$

$$= - \frac{\partial p}{\partial z} + \mu \left(\frac{\partial^2 u_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} \right) + \rho B_z$$

Οι εξισώσεις Navier-Stokes σε κυλινδρικές συντεταγμένες (r, θ, z)

Συναρτήσει του τανυστή τάσεων:

r – συνιστώσα,[b] $\rho \left(\frac{\partial u_r}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_r}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} - \frac{u_\theta^2}{r} + u_z \frac{\partial u_r}{\partial z} \right)$

$$= - \frac{\partial p}{\partial r} + \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r\, \tau_{rr}) + \frac{1}{r} \frac{\partial \tau_{r\theta}}{\partial \theta} - \frac{\tau_{\theta\theta}}{r} + \frac{\partial \tau_{rz}}{\partial z} \right) + \rho B_r$$

θ– συνιστώσα,[b] $\rho \left(\frac{\partial u_\theta}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_\theta}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} - \frac{u_r u_\theta}{r} + u_z \frac{\partial u_\theta}{\partial z} \right)$

$$= - \frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial \theta} + \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2\, \tau_{r\theta}) + \frac{1}{r} \frac{\partial \tau_{r\theta}}{\partial \theta} + \frac{\partial \tau_{\theta z}}{\partial z} \right) + \rho B_r$$

z– συνιστώσα, $\rho \left(\frac{\partial u_z}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_z}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \theta} - \frac{u_r u_\theta}{r} + u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} \right)$

$$= - \frac{\partial p}{\partial z} + \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r\, \tau_{rz}) + \frac{1}{r} \frac{\partial \tau_{\theta z}}{\partial \theta} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} \right) + \rho B_z$$

Συναρτήσει βαθμίδων

r – συνιστώσα,[b] $\rho\left(\frac{\partial u_r}{\partial t} + u_r\frac{\partial u_r}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r}\frac{\partial u_r}{\partial \theta} - \frac{u_\theta^2}{r} + u_z\frac{\partial u_r}{\partial z}\right)$

$$= -\frac{\partial p}{\partial r} + \mu\left[\frac{\partial}{\partial \theta}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta}(ru_r)\right) + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 u_r}{\partial \theta^2} - \frac{2}{r^2}\frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial^2 u_r}{\partial z^2}\right] + \rho B_r$$

θ– συνιστώσα,[b] $\rho\left(\frac{\partial u_\theta}{\partial t} + u_r\frac{\partial u_\theta}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r}\frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} - \frac{u_r u_\theta}{r} + u_z\frac{\partial u_\theta}{\partial z}\right)$

$$= -\frac{1}{r}\frac{\partial p}{\partial \theta} + \mu\left[\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(ru_\theta)\right) + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 u_\theta}{\partial \theta^2} + \frac{2}{r^2}\frac{\partial u_r}{\partial \theta} + \frac{\partial^2 u_\theta}{\partial z^2}\right] + \rho B_\theta$$

z– συνιστώσα, $\rho\left(\frac{\partial u_z}{\partial t} + u_r\frac{\partial u_z}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r}\frac{\partial u_z}{\partial \theta} + u_z\frac{\partial u_z}{\partial z}\right)$

$$= -\frac{\partial p}{\partial z} + \mu\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial u_z}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 u_z}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2}\right] + \rho B_z$$

3. 4. 2 Εξισώσεις διατήρησης της ενέργειας

Υπάρχουν δυο επιπρόσθετες επιδράσεις που συνεισφέρουν στη ροή θερμότητας εκτός της αγωγής. Όταν η μέση ταχύτητα $\mathbf{v}_i$ μιας συνιστώσας i διαφέρει από την μαζικά μέση ταχύτητα του μίγματος, υπάρχει τότε μια ροή μάζας $\rho_i \mathbf{V_i}$ της συνιστώσας i δια μέσω μιας επιφάνειας κινούμενης με την μαζικά μέση ταχύτητα του μίγματος. Εάν η μέση (ανά μονάδα επιφάνειας) ενθαλπία του i συστατικού είναι h_i , τα μόρια του θα μεταφέρουν δια μέσω της επιφάνειας μια επιπλέον ενθαλπία ανα μονάδα επιφάνειας και χρόνου ίση με $h_i \rho_i \mathbf{V_i}$ ή $\rho_i h_i Y_i \mathbf{V_i}$. Η ολική ενθαλπία σε σχέση με την μαζικά μέση ταχύτητα είναι $\boldsymbol{\rho} \sum_{i=1}^{N} \mathbf{h_i Y_i V_i}$. Αυτή η ροή ενέργειας που προκαλείται από διεργασίες ενδοδιάχυσης είναι μια περαιτέρω συνιστώσα στη ροή θερμότητας q.

Επίσης υπάρχουν και συνεισφορές από την λεγόμενη επίδραση Soret που λέγει οτι θερμοκρασιακές βαθμίδες προκαλούν ταχύτητες διάχυσης (θερμική διάχυση) και το αντίθετο, η επίδραση Dufour που λέγει οτι βαθμίδες συγκέντρωσης προκαλούν ροή θερμότητας . Η συνολική ροή θερμότητας μπορεί λοιπόν να εκφραστεί ως:

$$\mathbf{q} = -\lambda\nabla T + \boldsymbol{\rho}\sum_{i=1}^{N}\mathbf{h_i Y_i V_i} + \mathbf{R_u T}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\left(\frac{X_j\ a_j}{W_i D_{i\,j}}\right)(\mathbf{V_i} - \mathbf{V_j}) \qquad (3.28)$$

Επίσης χρήσιμες σχέσεις είναι οι κάτωθι :

$$\mathbf{e_i = e + \frac{u_i u_i}{2}} \qquad (3.29)$$

$$\mathbf{e = h - \frac{p}{\rho} = \sum_{i\approx 1}^{N} h_i Y_i - \frac{p}{\rho}} \qquad (3.30)$$

$$\mathbf{h_i = \Delta h^o{}_{f,i} + \int_{T^o}^{T} C_{p,i}\, dT} \qquad (3.31)$$

όπου e_i είναι η συνολική ενέργεια ανα μονάδα μάζας , e είναι η ειδική εσωτερική ενέργεια και $\Delta \boldsymbol{h^o}_{f,i}$ είναι η ενθαλπία σχηματισμού του i συστατικού. Στον πίνακα 3.5 παρατίθεται η εξίσωση της ενέργειας.

ΠΙΝΑΚΑΣ 3.5 Εξίσωση Ενέργειας

Καρτεσιανές συντεταγμένες (x, y, z):

$$\rho\, C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + u_x \frac{\partial T}{\partial x} + u_y \frac{\partial T}{\partial y} + u_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) - \left(\frac{\partial p}{\partial t} + u_x \frac{\partial p}{\partial x} + u_y \frac{\partial p}{\partial y} + u_z \frac{\partial p}{\partial z} \right)$$

$$= \lambda \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) - \sum_{i\approx 1}^{N} \omega_i\, \Delta h^o{}_{f,i}$$

$$- \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\rho\, T \sum_{i\approx 1}^{N} C_{pi} Y_i V_{ix} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho\, T \sum_{i\approx 1}^{N} C_{pi} Y_i V_{iy} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\rho\, T \sum_{i\approx 1}^{N} C_{pi} Y_i V_{iz} \right) \right]$$

$$+ \mu \left\{ 2 \left[\left(\frac{\partial u_x}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial u_y}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial u_z}{\partial z}\right)^2 \right] + \left[\frac{\partial u_y}{\partial x} + \frac{\partial u_x}{\partial y} \right]^2 \right.$$

$$\left. + \left[\frac{\partial u_z}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial z} \right]^2 + \left[\frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial x} \right]^2 - \frac{2}{3} \left[\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right]^2 \right\}$$

$$+ \rho \sum_{i\approx 1}^{N} Y_i \left(f_{ix} V_{ix} + f_{iy} V_{iy} + f_{iz} V_{iz} \right)$$

Κυλινδρικες συντεταγμένες (r, θ, z) :

$$\rho\, C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + u_r \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial T}{\partial \theta} + u_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) - \left(\frac{\partial p}{\partial t} + u_r \frac{\partial p}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial p}{\partial \theta} + u_z \frac{\partial p}{\partial z} \right)$$

$$= \lambda \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 T}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right] - \sum_{i\approx 1}^{N} \omega_i\, \Delta h^o{}_{f,i}$$

$$- \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r\, \rho\, T \sum_{i\approx 1}^{N} C_{pi} Y_i V_{ir} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\rho\, T \sum_{i\approx 1}^{N} C_{pi} Y_i V_{i\theta} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\rho\, T \sum_{i\approx 1}^{N} C_{pi} Y_i V_{iz} \right) \right]$$

$$+ \mu \left\{ 2 \left[\left(\frac{\partial u_r}{\partial r}\right)^2 + \left(\frac{1}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + \frac{u_r}{r} \right)^2 + \left(\frac{\partial u_z}{\partial z}\right)^2 \right] + \left[r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{u_\theta}{r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} \right]^2 \right.$$

$$+ \left[\frac{1}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \theta} + \frac{\partial u_\theta}{\partial z} \right]^2 + \left[\frac{\partial u_r}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial r} \right]^2$$

$$- \frac{2}{3} [\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r u_r) + \frac{1}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial u_z}{\partial z}]^2 \}$$

$$+ \rho \sum_{i \approx 1}^{N} Y_i (f_{ir} V_{ir} + f_{i\theta} V_{i\theta} + f_{iz} V_{iz})$$

Για να επιλυθεί το σύστημα των εξισώσεων διατήρησης για ένα πολυσυστατικό σύστημα οι ταχύτητες διάχυσης V_i πρέπει να προσδιοριστούν. Ο προσεγγιστικός τρόπος είναι να χρησιμοποιηθεί ο νόμος του Fick ενώ ο πιο ακριβής αλλά πολύ πιο πολύπλοκος τρόπος είναι να υπολογιστούν οι ταχύτητες αυτές από την γενική εξίσωση διάχυσης για πολυσυστατικά συστήματα όπως αυτή λαμβάνεται μέσω ανάλυσης με την χρήση της κινητικής θεωρίας των αερίων.

3.5 Επίλυση ενός πολυσυστατικού συστήματος

Χρήσιμες σχέσεις που συμπληρώνουν τις προαναφερθείσες εξισώσεις είναι: ο ρυθμός παραγωγής /κατανάλωσης ενός συστατικού μέσω χημικών αντιδράσεων

$$\omega_i = W_i \sum_{k \approx 1}^{N} (v''_{i,k} - v'_{i,k}) B_k T^{ak} e^{-\frac{E_{ak}}{R_u t}} \prod_{j \approx 1}^{N} (\frac{X_j p}{R_u T})^{v'_{i,k}} \qquad (3.32)$$

όπου M ο συνολικός αριθμός αντιδράσεων και N ο συνολικός αριθμός συστατικών και η καταστατική εξίσωσή

$$p = \rho R_u T \sum_{i \approx 1}^{N} \frac{Y_i}{W_i} \qquad (3.33)$$

Εάν τα V_i αντικατασταθούν μέσω του νόμου του Fick στις εξισώσεις των συστατικών και της ενέργειας τότε για ένα σύστημα με N συστατικά υπάρχουν N+6 άγνωστοι . Αυτοί είναι :

$Y_1 , Y_2 , \ldots\ldots Y_N , \rho , T , p , u , v , w$

Οι N + 6 εξισώσεις που πρέπει να λυθούν είναι :

1 εξίσωση συνολικής συνέχειας	Εξ. (3.18)
3 εξίσωσεις ορμής	Πίνακας 3.2
1 εξίσωση ενέργειας	Πίνακας 3.5
N-1 εξίσωσεις συστατικών	Πίνακας 3.1
1 καταστατική εξίσωση	Εξ. (3.33)
1 εξίσωση που συνδέει όλα τα Y_i π.χ. $\Sigma Y_i = 1$	

3.6 Ο μετασχηματισμός SHVAB – ZEL'DOVICH

Σε πολλές εφαρμογές ιδιαίτερου ενδιαφέροντος του μηχανικου πολλές από τις επιδράσεις που καθιστούν το ανώτερω σύστημα των εξισώσεων πολύπλοκο μπορεί να θεωρηθούν αμελητέες. Κάνοντας επιπλέον μια σειρά από υποθέσεις μπορούμε να απλοποιήσουμε το ανώτερω σύστημα των εξισώσεων σημαντικά. Θεωρούμε αμελητέες 1) πεδιακές δυνάμεις (όροι f_i), 2) τις επιδράσεις Soret και Dufour (όροι με α_i), 3) όροι με βαθμίδες πιέσεων (για μόνιμη υποηχητική ροή $p \approx$ const), 4) το ολικό ιξώδες αμελητέο.

Επίσης υποθέτουμε οτι οι δυαδικοί συντελεστές διάχυσης D_i, για όλα τα ζεύγη των συστατικών είναι ίσοι και οτι ο αριθμός Lewis είναι μονάδα. Παρενθετικά αναφέρουμε τους ορισμούς των κατώθι αδιάστατων αριθμών :

Lewis : $$\mathbf{Le} = \frac{\lambda}{\rho\, c_p D} = \frac{\alpha}{D} = \frac{\text{ρυθμος μεταφορας ενεργειας}}{\text{ρυθμος μεταφορας μαζας}}$$

Prandtl : $$\mathbf{Pr} = \frac{c_p\, \mu}{\lambda} = \frac{\nu}{\alpha} = \frac{\text{ρυθμος μεταφορας ορμης}}{\text{ρυθμος μεταφορας ενεργειας}}$$

Schmidt : $$\mathbf{Sc} = \frac{\nu}{D} = \frac{\text{ρυθμος μεταφορας ορμης}}{\text{ρυθμος μεταφορας μαζας}}$$

$$\mathbf{Le} = \frac{Sc}{\mathrm{Pr}}$$

Με τις ανωτέρω υποθέσεις η Shvab-Zel'dovich, (Kuo, 1986) μορφή της εξίσωσης των συστατικών είναι

$$\nabla \cdot \{ \rho v Y_i - \rho D \nabla Y_i \} = \omega_i \tag{3.34}$$

ενώ η Shvab-Zel'dovich μορφή της εξίσωσης της ενέργειας είναι

$$\nabla \cdot \{\rho v \int_{T^o}^{T} C_p\, dT - \rho D \nabla \int_{T^o}^{T} C_p\, dT \} = - \sum_{i \approx 1}^{N} \Delta h^o_{f,i} \tag{3.35}$$

Ο μετασχηματισμός Shvab-Zel'dovich είναι ιδιαίτερα χρήσιμος όταν είναι δυνατό να υποθέσουμε οτι μόνο μια (συνολική) χημική αντδρασή διέπει το σύστημα, ήτοι:

$$\sum_{i \approx 1}^{N} \mathbf{v'_i\ M_i} \rightarrow \sum_{i \approx 1}^{N} \mathbf{v''_i\ M_i} \tag{3.38}$$

Σε αυτή την περίπτωση :

$$\frac{\omega_i}{W_i (v_i^{//} - v_i^{/})} = \omega \qquad i = 1,2 \ldots\ldots, N \tag{3.39}$$

Ορίζοντας δυο νέες παραμέτρους η_T και η_i ως (3.40) , (3.41)

$$\eta_T = \frac{\int_{T^o}^{T} C_p \; dT}{\sum_{i\approx 1}^{N} \Delta h^o_{f,i} \; W_i \; (v_i^{/} - v_i^{//})} \quad , \; i = 1,2,\ldots\ldots N \qquad (3.40)$$

$$\eta_i = \frac{Y_i}{W_i (v_i^{//} - v_i^{/})} \qquad i = 1,2 \ldots\ldots, N \qquad (3.41)$$

η εξίσωση ενέργειας γίνεται :

$$\nabla \cdot [\, \rho v \, \eta_T - \rho \, D \, \nabla \; \eta_T \,] = \omega \qquad (3.42)$$

και η εξίσωση συστατικών γίνεται :

$$\nabla \cdot [\, \rho v \, \eta_i - \rho \, D \, \nabla \; \eta_i \,] = \omega \qquad (3.43)$$

ο μη γραμμικός όρος ω μπορεί να απαλειφεί στις N από τις N+1 εξισώσεις που μπορούν γενικά να γραφούν :

$$L(\eta) = \omega \qquad (3.44)$$

Όπου L είναι ο γραμμικός τελεστής (ρD ανεξάρτητο του η)

$$L(\eta) = \nabla \cdot [\, \rho v \, \eta - \rho \, D \, \nabla \; \eta \,] \qquad (3.45)$$

και η μπορεί να είναι η_T , η_1 , η_2 ,...........η_N .
Το η_1 μπορεί να ευρεθεί από την εξίσωση:

$$L(\eta_1) = \omega \qquad (3.46)$$

και οι άλλες ροϊκές μεταβλητές μπορούν να προσδιοριστούν από την γραμμική συνάρτηση :

$$L(\beta) = 0 \qquad (3.47)$$

Όπου β μπορεί να είναι β_T , β_1 , β_2 , …….., β_N και :

$$\beta_T = \eta_T - \eta_1 \, , \; \beta_2 = \eta_2 - \eta_1 \, , \ldots\ldots , \; \beta_N = \eta_N - \eta_1 \qquad (3.48)$$