N E W S
OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF THE REPUBLIC OF KAZAKHSTAN
PHYSICO-MATHEMATICAL SERIES
ISSN 1991-346X
Volume 6, Number 310 (2016), 80 – 88

UDC 539.2/.6

K.B. Zhakupov

Institute of Mathematics and Mathematical Modeling, Almaty, Kazakhstan
e-mail: jakupovKB@mail.ru

MODELING THERMAL BARODIFFUSION WITH CHEMICAL REACTIONS IN LIQUIDS AND GASES

Abstract. This article presents inductive method of the universal law of conservation of mass diffusion equation for the density of diffusing particles involved in chemical reactions, which speed is referred to mass unit and volume unit. On the basis of the Fick's law, this equation is formulated for concentration of mixture components. This equation is for the relative speed difference component with a carrier medium speed. The various forms of the equations diffusions for compressible and incompressible media are given. Inappropriateness of known laws on thermal barodiffusion over the law of conservation of mass is proved. Adequate laws of pressure and thermal diffusion are proposed and justified. Relevant equations of thermal barodiffusion with chemical reactions in liquids and gases are formulated. The problems of equations of thermal barodiffusion in an incompressible fluid are given.
Keywords: thermal diffusion, barodiffusion, mass, law, chemistry, reaction, pressure, equation.

УДК 539.2/.6

К.Б.Джакупов

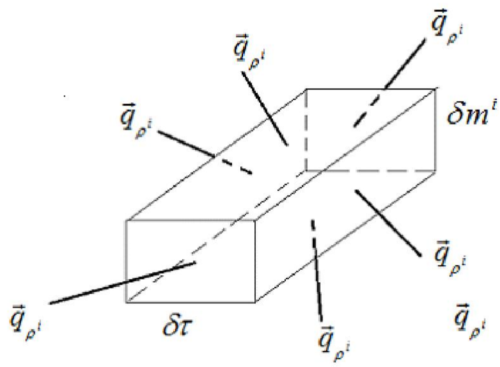
Институт математики и математического моделирования МОН РК, Алматы, Казахстан

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕРМОБАРОДИФФУЗИЙ С ХИМИЧЕСКИМИ РЕАКЦИЯМИ В ЖИДКОСТЯХ И ГАЗАХ

Аннотация. Выводится индуктивным методом из закона сохранения массы универ-сальное уравнение диффузии для плотности диффундирующих частиц, участвующих в химических реакциях, скорости которых отнесены к единице массы и к единице объема. На основании закона Фика данное уравнение формулируется для концентраций компонентов смеси. Получено уравнение для относительной разности скоростей компонент со скоростью несущей среды. Приводятся различные формы уравнений диффузий для сжимаемых и несжимаемых сред. Доказана неадекватность известных законов термобародиффузий закону сохранения массы. Предложены и обоснованы адекватные законы бародиффузий и термодиффузий, при которых выпоняется закон сохранения массы. Сформулированы соответствующие уравнения термобародиффузий с химическими реакциями в жидкостях и газах. Указаны проблемы уравнений баро-диффузий в динамических несжимаемых жидкостях.
Ключевые слова: термодиффузия, бародиффузия, масса, закон, химия, реакция,давление, уравнения.

В индивидуальном объеме $\delta\tau$, движущемся со скоростью $\vec{v}$, диффун- дируют частицы m_k^i, $i = 1,\dots,N$ со скоростями $\vec{v}_k^i$, поэтому среднемассовая скорость определяется отношением

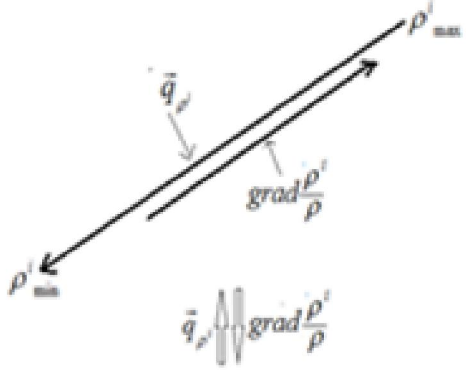
$$\vec{v}^i = \frac{\sum_k m_k^i \vec{v}_k^i}{\sum_k m_k^i} = \frac{\sum_k m_k^i \vec{v}_k^i}{\delta m^i}$$



Плотность частиц задается суммарной массой частиц $\delta m^i = \sum_k m_k^i$ к объему $\rho^i = \dfrac{\delta m^i}{\delta\tau}$,

$$\delta m^i = \rho^i \delta\tau, \ \sum_{i=1}^{N} \rho^i = \rho, \ \sum_{i=1}^{N} \delta m^i = \delta m.$$

Концентрации i –го сорта частиц: $C_i = \dfrac{\rho^i}{\rho}, \sum_{i=1}^{N} C_i = 1.$ В основной несущей среде $\delta\tau$ частицы m_k^i диффундируют из области с большой плотностью $\rho^i{}_{\max}$ в район с меньшей $\rho^i{}_{\min}$ плотностью. Как показано на рисунке, вектор потока частиц параллелен и направлен противоположно градиенту концентрации.



Следовательно, поток $\vec{q}_{\rho^i}$ частиц m_k^i связан с градиентом концентраций формулой антипараллельности векторов - закон Фика:

$$\vec{q}_{\rho^i} = -D\rho grad \frac{\rho^i}{\rho} = -D\rho gradC_i \tag{1}$$

По физическому же смыслу $D \geq 0$ является коэффициентом диффузии.

1°. Универсальное уравнение диффузии

Применение закона сохранения массы в объеме $\delta\tau$:

$$\frac{d\delta m}{dt} = 0, \ \frac{d}{dt}\sum_{i=1}^{N} \delta m^i = 0 \tag{2}$$

Закон сохранения массы δm^i в объеме $\delta\tau$ должен сохранять эквивалентный вид исходного закона (2) и учитывать диффузию, химические и другие виды реакций. Таким требованиям соответствует закон сохранения массы

$$\frac{d\delta m^i}{dt} = -\delta\tau div\vec{q}_{\rho^i} + \delta m^i J^i + \delta\tau j^i, \tag{3}$$

где $div\vec{q}_{\rho^i}$ – диффузия частиц, $J^i = \sum_k J^{ki}$, скорость изменения массы вследствие реакций J^{ki}, причем должно выполняться условие $\sum_{i=1}^{N} \rho^i J^i = \sum_{i=1}^{N}\sum_k \rho^i J^{ki} = 0$. Под J^i понимается отнесенная к единице ***массы*** скорость прироста массы i-й компоненты за счет реакций перехода от k-х компонент к i-й со скоростями J^{ki}. Аналогично j^i скорость изменения массы вследствие реакций $j^i = \sum_k j^{ki}$, $\sum_{i=1}^{N} j^i = \sum_{i=1}^{N}\sum_k \rho^i j^{ki} = 0$, но здесь под j^i понимается отнесенная к единице ***объема*** скорость прироста массы i-й компоненты за счет реакций перехода от k-х компонент к i-й со скоростями j^{ki}.

Просуммировав (3) по всем i, находим выражение

$$\sum_{i=1}^{N} \frac{d\delta m^i}{dt} = -\delta\tau \sum_{i=1}^{N} div\vec{q}_{\rho^i} + \sum_{i=1}^{N} \delta m^i J^i + \delta\tau \sum_{i=1}^{N} j^i \tag{4}$$

где в правой части все суммы равны нулю:

$$-\sum_{i=1}^{N} div\vec{q}_{\rho^i} = div\sum_{i=1}^{N} D\rho gradC_i = div(D\rho grad\sum_{i=1}^{N} C_i) = div(D\rho grad1) = 0,$$

$$\sum_{i=1}^{N} \delta m^i J^i = \sum_{i=1}^{N} \rho^i \delta\tau J^i = \delta\tau \sum_{i=1}^{N}\sum_k \rho^i J^{ki} = 0, \delta\tau \sum_{i=1}^{N} j^i = \delta\tau \sum_{i=1}^{N}\sum_k j^{ki} = 0$$

В результате (4) переходит в (3), закон сохранения массы выполнен:

$$\sum_{i=1}^{N} \frac{d\delta m^i}{dt} = 0, \quad \frac{d}{dt}\sum_{i=1}^{N} \delta m^i = 0, \quad \frac{d\delta m}{dt} = 0$$

Имеют место понятные преобразования:

$$\frac{d\rho^i \delta\tau}{dt} = -\delta\tau div\vec{q}_{\rho^i} + \delta m^i J^i + \delta\tau j^i,$$

$$\delta\tau \frac{d\rho^i}{dt} + \rho^i \frac{d\delta\tau}{dt} = -\delta\tau div\vec{q}_{\rho^i} + \rho^i \delta\tau J^i + \delta\tau j^i$$

Подставляя $\frac{d\delta\tau}{dt} = \delta\tau div\vec{v}^i$, получаем

$$\delta\tau \frac{d\rho^i}{dt} + \rho^i \delta\tau div\vec{v}^i = -\delta\tau div\vec{q}_{\rho^i} + \rho^i \delta\tau J^i + \delta\tau j^i \tag{5}$$

Подстановка закона Фика (1) в (5) и сокращение дает универсальное уравнение диффузии:

$$\frac{d\rho^i}{dt} + \rho^i div\vec{v}^i = div(D\rho grad\frac{\rho^i}{\rho}) + \rho^i J^i + j^i,$$

где полная производная равна $\frac{d\rho^i}{dt} = \frac{\partial \rho^i}{\partial t} + (\vec{v}^i, grad\,\rho^i)$:

$$\frac{\partial \rho^i}{\partial t} + (\vec{v}^i, grad\,\rho^i) + \rho^i div\vec{v}^i = div(D\rho grad\frac{\rho^i}{\rho}) + \rho^i J^i + j^i$$

Свертывание $(\vec{v}^i, grad\,\rho^i) + \rho^i div\vec{v}^i = div(\rho^i \vec{v}^i)$ приводит к дивергентному виду уравнения диффузии

$$\frac{\partial \rho^i}{\partial t} + div(\rho^i \vec{v}^i) = div(D\rho grad\frac{\rho^i}{\rho}) + \rho^i J^i + j^i \tag{6}$$

В [1,3] для установления связи динамики данных частиц с динамикой несущей среды вводится разность скоростей $\vec{v}^* = \vec{v}^i - \vec{v}, \vec{v}^i = \vec{v}^* + \vec{v}$.

В результате уравнению (6) придается вид

$$\frac{\partial \rho^i}{\partial t} + div[\rho^i(\vec{v}^* + \vec{v})] = div(D\rho grad\frac{\rho^i}{\rho}) + \rho^i J^i + j^i \tag{7}$$

Теорема 1. *Разность скоростей* $\vec{v}^* = \vec{v}^i - \vec{v}$ *является решением уравнения* $div(\vec{v}^*\rho) = 0$.

Доказательство. Просуммируем (8) по всем сортам частиц

$$\sum_{i=1}^{N}\{\frac{\partial \rho^i}{\partial t} + div[\rho^i(\vec{v}^* + \vec{v})]\} = \sum_{i=1}^{N}\{div(D\rho grad\frac{\rho^i}{\rho}) + \rho^i J^i + j^i\}$$

Знак суммирования относится к индексу «i»:

$$\frac{\partial}{\partial t}\sum_{i=1}^{N}\rho^i + div(\vec{v}^*\sum_{i=1}^{N}\rho^i) + div(\vec{v}\sum_{i=1}^{N}\rho^i) = div(D\rho grad\sum_{i=1}^{N}\frac{\rho^i}{\rho}) + \sum_{i=1}^{N}\rho^i J^i + \sum_{i=1}^{N} j^i \tag{8}$$

В полученном выражении

$$div(D\rho grad\sum_{i=1}^{N}\frac{\rho^i}{\rho}) = div(D\rho grad 1) = 0, \sum_{i=1}^{N}\rho^i J^i = 0, \sum_{i=1}^{N} j^i = 0$$

в результате (8) переходит в уравнение

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + div(\vec{v}^*\rho) + div(\rho\vec{v}) = 0,$$

из которого, в силу уравнения неразрывности $\frac{\partial \rho}{\partial t} + div(\rho\vec{v}) = 0$,

вытекает для $\vec{v}^*$ уравненя в частных производных

$$div(\vec{v}^*\rho) = 0 \tag{9}$$

Что требовалось доказать.

Для несжимаемой жидкости получается уравнение $div\vec{v}^* = 0$.

Уравнение (9) имеет очевидное решение $\vec{v}^*\rho = rot\vec{\Psi}$, $divrot\vec{\Psi} \equiv 0$,

где $\vec{\Psi} = \vec{\Psi}(\vec{r}, t)$ – произвольная дифференцируемая функция, которой можно манипулировать при моделировании диффузий живых существ (бактерий).

Бактерии в поисках корма могут двигаться в сторону большей концентрации питательных веществ в среде.

2°. Искусственное уравнение концентрации

Искусственное уравнение диффузии для концентрации получается из уравнения (6) подстановкой $\rho^i = C_i \rho$:

$$\frac{\partial C_i \rho}{\partial t} + div(C_i \rho \vec{v}^i) = div(D\rho gradC_i) + C_i \rho J^i + j^i$$

По связи $\vec{v}^i = \vec{v}^* + \vec{v}$ получается иная запись

$$\frac{\partial C_i \rho}{\partial t} + div(C_i \rho(\vec{v}^* + \vec{v})) = div(D\rho gradC_i) + C_i \rho J^i + j^i,$$

где показано участие скорости несущей среды $\vec{v}$ в диффузии. Отсутствие относительных скоростей $\vec{v}^* \equiv 0$ является тривиальным решением уравнения теоремы $div(\vec{v}^* \rho) = 0$, что означает совпадение среднемассовой скорости диффундирующих частиц со скоростью несущей среды.

3°. Уравнения диффузии при совпадении среднемассовой скорости частиц со скоростью несущей среды $\vec{v}^* \equiv 0$

При совпадении среднемассовой скорости частиц со скоростью несущей среды $\vec{v}^i = \vec{v}, \vec{v}^* = \vec{v}^i - \vec{v} = 0$, что применяется наиболее часто, уравнение (7) принимает вид:

$$\frac{\partial \rho^i}{\partial t} + div(\rho^i \vec{v}) = div(D\rho grad\frac{\rho^i}{\rho}) + \rho^i J^i + j^i,$$

соответственно, уравнение концентраций

$$\frac{\partial C_i \rho}{\partial t} + div(C_i \rho \vec{v}) = div[D\rho gradC_i] + C_i \rho J^i + j^i$$

В данном уравнении делаются упрощающие преобразования:

$$C_i \frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \frac{\partial C_i}{\partial t} + (\vec{v}, grad(C_i \rho)) + C_i \rho div\vec{v} = div(D\rho gradC_i) + C_i \rho J^i + j^i,$$

где уравнение неразрывности несущей среды равно нулю:

$$C_i \frac{\partial \rho}{\partial t} + C_i(\vec{v}, grad\rho) + C_i \rho div\vec{v} = C_i[\frac{d\rho}{dt} + \rho div\vec{v}] = 0$$

Таким образом, исходное фундаментальное уравнение диффузии (6) переходит в уравнение концентрации с участием плотности и скорости несущей среды:

$$\rho \frac{\partial C_i}{\partial t} + \rho(\vec{v}, gradC_i) = div(D\rho gradC_i) + C_i \rho J^i + j^i \quad (10)$$

4°. Уравнение концентрации в неподвижной среде $\vec{v} \equiv 0$

Уравнение диффузии в неподвижной основной среде $\vec{v} \equiv 0$ и переменной плотности ρ:

$$\frac{\partial C_i \rho}{\partial t} + div(C_i \rho \vec{v}^i) = div(D\rho gradC_i) + C_i \rho J^i + j^i$$

В данном уравнении $\vec{v}^i = \vec{v}^*$, следовательно, скорости $\vec{v}^i$ частиц должны быть вычислены из уравнения **теоремы 1** $div(\vec{v}^i \rho) = 0$.

В основном используется предположение, что частицы неподвижны $\vec{v}^i \equiv 0$ и диффундируют в покоящейся среде $\vec{v} \equiv 0$. Поэтому уравнение концентрации для переменной плотности $\rho \neq const$ принимает вид:

$$\frac{\partial C_i \rho}{\partial t} = div(D\rho gradC_i) + C_i \rho J^i + j^i$$

5°. Уравнения концентрации в неподвижной и несжимаемой среде

Для неподвижной $\vec{v} \equiv 0$ несжимаемой $\rho = const$ несущей среды после сокращений получается уравнение концентрации

$$\rho\frac{\partial C_i}{\partial t} = div(D\rho gradC_i) + C_i\rho J^i + j^i, \quad \frac{\partial C_i}{\partial t} = \frac{1}{\rho} div(D\rho gradC_i) + C_i J^i + \frac{j^i}{\rho}$$

Подставляя в правую часть $\rho = \rho^i / C_i$, находим уравнение

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = \frac{C_i}{\rho^i} div(D\rho gradC_i) + C_i J^i + \frac{C_i}{\rho^i} j^i,$$

из которого после умножения на получается

$$\rho^i \frac{\partial C_i}{\partial t} = C_i div(D\rho gradC_i) + \rho^i C_i J^i + C_i j^i$$

Уравнение концентрации принимает упрощенный вид, если нет химических реакций и других включений $J^i \equiv 0,\ j^i \equiv 0$:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = div[DgradC_i]$$

При $D \equiv const$ вытекает параболическое уравнение $\dfrac{\partial C_i}{\partial t} = D\Delta C_i$.

7°. Парадоксы уравнений термодиффузии

Градиент температуры, несомненно, оказывает влияние на диффузию по вполне понятным причинам молекулярного переноса. Термодиффузия (эффект Соре) в законе сохранения массы требует дополнения

$$\delta\tau \frac{d\rho^i}{dt} + \rho^i \delta\tau div\vec{v}^i = -\delta\tau div\vec{q}_{\rho^i} + \rho^i \delta\tau J^i + \delta\tau j^i - \delta\tau div\vec{q}_T, \tag{11}$$

где введен закон термодиффузии по Лыкову [3]:

$$\vec{q}_T = -D\rho \frac{k_T}{T} gradT \tag{12}$$

Основное уравнение термодиффузии получается в виде [3]:

$$\frac{\partial \rho^i}{\partial t} + div(\rho^i \vec{v}^i) = div(D\rho grad\frac{\rho^i}{\rho}) + div(D\rho\frac{k_T}{T} gradT) + \rho^i J^i + j^i$$

Уравнение термодиффузии для концентраций и $\vec{v}^* \equiv 0$:

$$\rho\frac{\partial C_i}{\partial t} + \rho(\vec{v}, gradC_i) = div(D\rho gradC_i) + div(D\rho\frac{k_T}{T} gradT) + C_i\rho J^i + j^i$$

Парадоксальность и ошибочность уравнений термодиффузий, приведенных в [3] и основанных на законе термодиффузии (12), заключается в невыполнении закона сохранения массы, то есть получается $\frac{d}{dt}\sum_{i=1}^{N}\delta m^i \neq 0$. Действительно, суммирование по всем компонентам i уравнения (11) в правой части уравнения дает неравенство нулю по закону термодиффузии (12) [3]:

$$-\delta\tau \sum_{i=1}^{N} div\,\vec{q}_T = \delta\tau \sum_{i=1}^{N} D\rho \frac{k_T}{T} gradT \neq 0$$

В силу данного факта уравнения термодиффузии с данным в [3] термодиффузией (12) неадекватны закону сохранения массы.

Теорема 2. *Закон сохранения массы (2) удовлетворяется для закона термодиффузии с физическим участием концентрации данного диффун-дирующего компонента:*

$$\delta\tau \frac{d\rho^i}{dt} + \rho^i \delta\tau div\vec{v} = -\delta\tau div\vec{q}_{\rho^i} + \rho^i \delta\tau J^i + \delta\tau j^i - \delta\tau div\vec{q}_{Ti},$$

$$\vec{q}_{Ti} = -D\rho(1 - N\cdot C_i)\frac{k_T}{T} gradT \quad (13)$$

Доказательство. Суммирование в (13) по всем компонентам дает для последнего члена уравнения выражение равное нулю:

$$-\sum_{i=1}^{N} div\vec{q}_{Ti} = \sum_{i=1}^{N} D\rho(1 - N\cdot C_i)\frac{k_T}{T} gradT =$$

$$= \sum_{i=1}^{N} D\rho\frac{k_T}{T} gradT - D\rho N\cdot\sum_{i=1}^{N} C_i \frac{k_T}{T} gradT =$$

$$= ND\rho\frac{k_T}{T} gradT - D\rho N\cdot 1\cdot\frac{k_T}{T} gradT = 0$$

Что требовалось доказать. Доказательства равенства нулю сумм остальных членов в правой части было осуществлено ранее. С применением закона термодиффузии (13) уравнения принимают прикладные виды:

$$\frac{\partial\rho^i}{\partial t} + div(\rho^i\vec{v}^i) = div(D\rho grad\frac{\rho^i}{\rho}) +$$

$$+ div(D\rho(1 - N\cdot C_i)\frac{k_T}{T} gradT) + \rho^i J^i + j^i,$$

$$\rho\frac{\partial C_i}{\partial t} + \rho(\vec{v}^i, gradC_i) = div(D\rho gradC_i) +$$

$$+ div(D\rho(1 - N\cdot C_i)\frac{k_T}{T} gradT) + C_i\rho J^i + j^i$$

8°. Уравнение термобародиффузии

В [3] учитывается бародиффузия:

$$\delta\tau\frac{d\rho^i}{dt} + \rho^i\delta\tau div\vec{v}^i = -\delta\tau div\vec{q}_{\rho^i} + \rho^i\delta\tau J^i + \delta\tau j^i - \delta\tau div\vec{q}_T - \delta\tau div\vec{q}_p,$$

где по Лыкову положено $\vec{q}_T = -D\rho\frac{k_T}{T} gradT, \vec{q}_p = -D\rho\frac{k_p}{p} gradp$. Нетрудно вычислить, что для данных законов термобародиффузии закон сохранения массы не выполняется.

Действительно, $-\sum_{i=1}^{N} div\vec{q}_p = \sum_{i=1}^{N} D\rho\frac{k_p}{p} gradp \neq 0.$ Поэтому уравнения термобародиффузии с данными в [3] законами $\vec{q}_T = -D\rho\frac{k_T}{T} gradT,\ \ \vec{q}_p = -D\rho\frac{k_p}{p} gradp$ неадекватны закону сохранения массы.

Теорема 3. *Закон сохранения массы (2) удовлетворяется для законов термобародиффузий с физическим участием концентрации данного диффунди- рующего компонента:*

$$\frac{d\rho^i}{dt} + \rho^i div\vec{v} = -div\vec{q}_{\rho^i} + \rho^i J^i + j^i - div\vec{q}_{Ti} - div\vec{q}_{pi}, \tag{14}$$

$$\vec{q}_{Ti} = -D\rho(1 - N\cdot C_i)\frac{k_T}{T} gradT,\ \vec{q}_{pi} = -D\rho(1 - N\cdot C_i)\frac{k_p}{p} gradp$$

Доказательство. Суммирование в (14) по всем компонентам дает для последнего члена уравнения выражение равное нулю:

$$-\sum_{i=1}^{N} div\vec{q}_{pi} = \sum_{i=1}^{N} D\rho(1 - N\cdot C_i)\frac{k_p}{p} gradp = \sum_{i=1}^{N} D\rho\frac{k_p}{p} gradp - D\rho N\cdot\sum_{i=1}^{N} C_i\frac{k_p}{p} gradp =$$

$$= ND\rho\frac{k_p}{p} gradp - D\rho N\cdot 1\cdot\frac{k_p}{p} gradp = 0$$

Что требовалось доказать. Доказательства равенства нулю сумм остальных членов в правой части были осуществлены ранее. С применением нового закона термобародиффузий дифференциальные уравнения принимают прикладные виды:

$$\frac{\partial\rho^i}{\partial t} + div(\rho^i\vec{v}^i) = div(D\rho grad\frac{\rho^i}{\rho}) + div(D\rho(1 - N\cdot C_i)\frac{k_T}{T} gradT) +$$

$$+ div(D\rho(1 - N\cdot C_i)\frac{k_p}{p} gradp) + \rho^i J^i + j^i,$$

$$\rho\frac{\partial C_i}{\partial t} + \rho(\vec{v}^i, gradC_i) = div(D\rho gradC_i) + div(D\rho(1 - N\cdot C_i)\frac{k_T}{T} gradT) +$$

$$+ div(D\rho(1 - N\cdot C_i)\frac{k_p}{p} gradp) + C_i\rho J^i + j^i$$

Примечание 1. Уравнения с бародиффузией имеют смысл только для сжимаемых сред с уравнениями состояния типа Клапейрона-Менделеева $p = \rho RT$. В уравнения динамики несжимаемой жидкости давление входит через градиент, поэтому определяется с точностью до аддитивной функции времени, то есть может принимать произвольные значения $-\infty < p < +\infty$. Но давление в законе бародиффузии стоит в знаменателе. **По этой причине в несжимаемой жидкости уравнения с бародиффузией не подлежат применению.**

ЛИТЕРАТУРА

[1] Лойцянский Л.Г. Механика жидкости и газа. - М.: “Наука”, 1973.
[2] Седов Л.И. Механика сплошной среды. - Т.1. М.: “Наука”, 1973.
[3] Лыков А.В.Тепломассобмен. - М.: «Энергия», 1972. С. 560.
[4] George E. Mase. Theory and Problems of Continium Mechanics. Schaum’s Outline Series. MCGRAW-HILL BOOK COMPANI. New York, St. Louis, San Francisco, London, Sydney, Toronto, Mexico and Panama 1970.
[5] Бэтчелор Дж. Введение в динамику жидкости. М.: «Мир», 1973.
[6] Ландау Л. Д., Лифщиц Е.М. Теоретическая физика. Т.6. Гидродинамика. - М.: “Наука”, 1973.
[7] Ильюшин А.А. Механика сплошной среды. -М.: Изд-во МГУ, 1978.
[8] Джакупов К.Б. Коррекции теоретических парадоксов механики сплошной среды. - Алматы: Изд-во «Ғылым ордасы», 2015. С. 376.
[9] Ильюшин А.А., Победря Б.Е. Основы математической теории термо-вязко-упругости. М.: «Наука»,1970. 547с.
[10] Ilyushin A.A., Lenski V.S. Strength of Materials. N.Y. Pergamon press, 1967.
[11] Eringen A.C. Mechanics of Continua.N.Y. , Wiley, 1967.
[12] Франк-Каменецкий Д.А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике М.: Наука, 1987. - 502 с.

REFERENCES

[1] LG Loitsiansky Fluid Mechanics. M.: "Hauka", **1973**.
[2] Sedov LI Mechanics of solid a medium, Vol.1. M.: "Hauka", **1973**.
[3] Lykov A.V.Teplomassobmen. - M .: "Energy", **1972**. p.560 .
[4] George E. Mase. Theory and Problems of Continium Mechanics. Schaum's Outline Series. MCGRAW-HILL BOOK COMPANI. New York, St. Louis, San Francisco, London, Sydney, Toronto, Mexico and Panama in 1970.
[5] John Batchelor . Introduction to fluid dynamics. M .: "Mir", **1973**.
[6] Landau L.D., EM Lifschits E.M. Theoretical physics. V.6. Hydrodynamics. - M.: " Hauka", **1973**.
[7] Ilyushin AA Continuum Mechanics sredy. M.: MGU, 1978. Science, **1987**. - 502 p.
[8] Dzhakupov KB Correction of theoretical paradoxes of continuum mechanics of a medium, Almaty: Publishing house " Gylym Ordasy", **2015**. p.376.
[9] Ilyushin AA Pobedria BE Fundamentals of the mathematical theory of thermo – viscoelasticity. M .: "Science", **1970**. 547 p .
[10] Ilyushin A.A., Lenski V.S. Strength of Materials. N.Y. Pergamon press, **1967**.
[11] Eringen A.C. Mechanics of Continua.N.Y., Wiley, **1967**.
[12] Frank-Kamenetskiy D.A. Diffusion and Heat Transfer in Chemical Kinetics M .: Science, **1987**. - 502 p.

К.Б. Жақып

ҚР БҒМ Математика және математикалық моделдеу институты, Алматы, Қазақстан

СҰЙЫҚТЫҚТАР МЕН ГАЗДАРДАҒЫ ХИМИЯЛЫҚ РЕАКЦИЯЛАРЫ БАР ТЕРМОБАРОДИФФУЗИЯЛАРДЫ МОДЕЛДЕУ

Аннотация. Химиялық реакцияларда, жылдамдықтары масса мен көлемнің бірдігіне келтірілген, диффундирлаған бөлшектердің тығыздығына масса сақталу заңынан диффузияның универсал теңдеуі құрылған. Фик заңының негізінде осы теңдеу қоспаның компонентерінің концентрациялары үшін белгіленеді. Компоненттер жылдамдықтарының тасушы ортаның жылдамдығынан салыстырмалы айырымдығына теңдеу алынған. Сығылатын және сығылмайтын орталарға сәйкес диффузия теңдеулерінің әр түрлі тұрпаттары келтірілген. Бұрыннан белгілі термобародиффузия заңдарының масса сақталу заңына сәйкестігінің жоқтығы дәлелденген. Бародиффузия мен термодиффузияның сәйкес заңдары берілген және негізделген, оларда масса сақталу заңы орындалатын. Осыларға арналған химиялық реакциялар бар сұйықтықтарда және газдарда термобародиффузияның сәйкес теңдеулері құрылған. Сығылмайтын қозғалыстағы сұйықтықтарда бародиффузия теңдеулерінің мәселелері көрсетілген.

Түйін сөздер: термодиффузия, бародиффузия, масса, заң, химия, реакция, қысым, теңдеулер.

Сведения об авторе:
Джакупов Кенес Бажкенович – доктор физико-математических наук, профессор, член-корреспондент РАЕ