

# ТЕОРИЯ ГАЗОВЫХ СМЕСЕЙ

В. Ф. КУРОПАТЕНКО

Российский федеральный ядерный центр – им.акад. Е.И.Забабахина, г. Снежинск, Россия

## 1. Идеальный газ

Характеристики сплошных сред, как правило, получаются в результате перехода с микроуровня на макроуровень. Рассмотрение такого перехода при построении макромодели смеси газов начнем с простейшей модели одноатомного идеального газа. Идеальный газ – это математическая абстракция, основанная на хорошо известных упрощающих гипотезах [1, 2]. Пусть в замкнутом объеме  $d\theta$  находится  $n$  невзаимодействующих молекул, движущихся со скоростями  $\bar{U}_v$ . В любой момент времени газ имеет массу  $dM$ , количество движения  $d\bar{K}$  и энергию  $dQ$ , которые определяются уравнениями

$$dM = \sum_{v=1}^n m_v, \quad (1)$$

$$d\bar{K} = \sum_{v=1}^n m_v \bar{U}_v, \quad (2)$$

$$dQ = \sum_{v=1}^n 0,5 m_v \bar{U}_v^2, \quad (3)$$

где  $m_v$  – масса  $v$ -й молекулы. Уравнения (1) и (2) позволяют определить первые две характеристики сплошной среды: плотность  $\rho$  и скорость  $\bar{U}$

$$\rho = \frac{dM}{d\theta}, \quad (4)$$

$$\bar{U} = \sum_{v=1}^n \eta_v \bar{U}_v, \quad (5)$$

где  $\eta_v = m_v/dM$  – массовая концентрация  $v$ -й молекулы. Барицентрическая [3] скорость  $\bar{U}$  определяет кинетическую энергию сплошной среды

$$dQ_1 = 0,5 \bar{U}^2 dM. \quad (6)$$

Из (1), (3), (5) и (6) следует, что  $dQ - dQ_1 \neq 0$  при  $\bar{U}_v \neq \bar{U}$ . Иными словами, полная кинетическая энергия молекул  $dQ$  при переходе на макроуровень разделилась на две части

$$dQ = dQ_1 + 0,5 \sum_{v=1}^n m_v (\bar{U}_v - \bar{U})^2. \quad (7)$$

Скорость  $\bar{U}_v - \bar{U}$  называется [4] тепловой скоростью молекулы  $v$ . Введем удельные на единицу массы характеристики сплошной среды:  $\varepsilon = dQ/dM$  – удельная полная энергия,  $0,5 \bar{U}^2$  – удельная кинетическая энергия. Разность между ними запишем в виде

$$H = \sum_{v=1}^n \eta_v H_v, \quad (8)$$

где

$$H_v = 0,5 (\bar{U}_v - \bar{U})^2.$$

При переходе на макроуровень информация об элементах микроструктуры забывается и  $H$  называется удельной внутренней энергией идеального газа

$$E = H. \quad (9)$$

Совокупность  $n$  молекул имеет  $3n$  степеней свободы поступательного движения. Из теоремы Больцмана о равномерном распределении энергии по  $0,5kT$  на каждую степень свободы следует выражение температуры через удельную внутреннюю энергию

$$T = \frac{2E}{3A}, \quad (10)$$

где индивидуальная газовая постоянная  $A = Nk/\mu$ .

Будем считать объем  $d\theta$  кубом с длиной ребра  $d\theta^{1/3}$  и площадью грани  $S_x = S_y = S_z = d\theta^{2/3}$ . Рассмотрим движение  $\nu$ -й молекулы в направлении грани  $S_x$ , ортогональной оси  $Ox$ . Это означает, что  $U_{\nu x} - U_x > 0$ . Молекула ударяется о грань  $S_x$  и отражается от нее. При этом ее количество движения изменяется на величину

$$\Delta \bar{K}_\nu = -2m_\nu(\bar{U}_\nu - \bar{U}).$$

Это изменение количества движения произошло под действием импульса  $\bar{f}_{\nu x} dt$ , где  $dt$  – очень малое время взаимодействия молекулы со стенкой. Отражившись от грани  $S_x$ , молекула летит в обратном направлении, отражается от противоположной грани и через время

$$\Delta t_\nu = \frac{2d\theta^{1/3}}{U_{\nu x} - U_x}$$

вновь ударяет по грани  $S_x$ . Чтобы перейти на макроуровень, заменим импульс  $\bar{f}_{\nu x} dt$  импульсом непрерывной на промежутке  $\Delta t_\nu$  силы

$$\bar{\varphi}_{\nu x} = \frac{\bar{f}_{\nu x} dt}{\Delta t_\nu}.$$

Из закона сохранения количества движения следует

$$\bar{\varphi}_{\nu x} = - \frac{m_\nu}{d\theta^{1/3}} (\bar{U}_\nu - \bar{U})(U_{\nu x} - U_x).$$

Просуммировав эти силы по всем молекулам и разделив на  $S_x = d\theta^{2/3}$ , получим выражение силы, действующей на газ со стороны единичной площадки грани  $S_x$

$$\bar{\varphi}_x = - \sum_{\nu=1}^n \frac{m_\nu}{d\theta} (\bar{U}_\nu - \bar{U})(U_{\nu x} - U_x).$$

С помощью (4) преобразуем выражение силы  $\bar{\varphi}_x$  к виду

$$\bar{\varphi}_x = - \rho \sum_{\nu=1}^n \eta_\nu (\bar{U}_\nu - \bar{U})(U_{\nu x} - U_x). \quad (11)$$

Аналогичные выражения получаются для сил, действующих на единичные площадки граней  $S_y, S_z$

$$\bar{\varphi}_y = - \rho \sum_{\nu=1}^n \eta_\nu (\bar{U}_\nu - \bar{U})(U_{\nu y} - U_y), \quad (12)$$

$$\bar{\varphi}_z = - \rho \sum_{\nu=1}^n \eta_\nu (\bar{U}_\nu - \bar{U})(U_{\nu z} - U_z). \quad (13)$$

Вектора  $\bar{\varphi}_x, \bar{\varphi}_y, \bar{\varphi}_z$  образованы элементами строк тензора  $\varphi$ , являющегося силой, действующей на газ со стороны стенки. Согласно третьему закону Ньютона, силы, действующие со стороны газа на стенку, должны иметь знак, противоположный знаку  $\bar{\varphi}_x, \bar{\varphi}_y, \bar{\varphi}_z$ . Тензор  $\varphi$  называется [4] тензором давлений. Диагональные его элементы  $-\varphi_{xx}, -\varphi_{yy}, -\varphi_{zz}$  равны нормальным напряжениям, недиагональные элементы  $-\varphi_{xy}, -\varphi_{xz}, -\varphi_{yz}$  равны касательным напряжениям сдвига. Сделаем два упрощающих предположения: 1. Удар молекулы о стенку абсолютно упругий. 2. Молекулы двигаются хаотически в объеме  $d\theta$ . В [4] показано, что при этих предположениях сдвиговые напряжения равны нулю, а нормальные напряжения равны между собой. Т.о. сделанные предположения приводят к основному уравнению кинетической теории газов

$$P = \frac{2}{3} \rho \sum_{v=1}^n \eta_v H_v .$$

С помощью (8) и (9) запишем это уравнение в виде, не содержащем величин микроуровня

$$P = \frac{2}{3} \rho E . \quad (14)$$

Из (10) и (14) следует термическое уравнение состояния одноатомного идеального газа

$$P = \rho T . \quad (15)$$

Т. о. переход с микроуровня на макроуровень завершен. Уравнения (10), (14) и (15) не содержат никакой информации о микроуровне. При переходе на макроуровень были выполнены все законы сохранения. В результате этого удельная полная энергия сплошной среды  $\varepsilon$  равна сумме удельной кинетической энергии и удельной внутренней энергии

$$\varepsilon = 0,5\bar{U}^2 + E .$$

## 2. Идеальный газ в смеси. Мезоуровень

Переход с микроуровня на макроуровень смеси является двухэтапным. На первом этапе перейдем на макроуровень отдельного газа (мезоуровень смеси) в соответствии с правилами, описанными выше. На втором этапе перейдем от макроуровней газов на макроуровень смеси. На обоих этапах должны выполняться законы сохранения массы, количества движения и энергии.

Пусть в объеме  $d\theta$  находится  $N$  идеальных газов. Каждый газ с номером  $i$  содержит  $n_i$  молекул и обладает массой  $dM_i$ , количеством движения  $d\bar{K}_i$  и энергией  $dQ_i$

$$dM_i = \sum_{v=1}^{n_i} m_{vi} , \quad d\bar{K}_i = \sum_{v=1}^{n_i} m_{vi} \bar{U}_{vi} , \quad dQ_i = \sum_{v=1}^{n_i} 0,5 m_{vi} \bar{U}_{vi}^2 .$$

Смесь в целом обладает массой  $dM$ , количеством движения  $d\bar{K}$  и энергией  $dQ$ , которые выражаются через соответствующие величины компонентов с помощью законов сохранения

$$dM = \sum_{i=1}^N dM_i , \quad d\bar{K} = \sum_{i=1}^N d\bar{K}_i , \quad dQ = \sum_{i=1}^N dQ_i . \quad (16)$$

Общее количество молекул  $n$  равно сумме молекул всех компонентов

$$n = \sum_{i=1}^N n_i .$$

Разделим объем  $d\theta$  между всеми молекулами. Объем, занимаемый  $i$ -м компонентом смеси, обозначим  $d\theta_i$ . Отношение

$$\alpha_i = \frac{d\theta_i}{d\theta}$$

называется [3] объемной концентрацией  $i$ -го компонента. Физическая плотность  $i$ -го компонента определяется уравнением

$$\rho_i = \frac{dM_i}{d\theta_i} . \quad (17)$$

Умножив и разделив (17) на  $d\theta$ , получим выражение для парциальной плотности

$$\alpha_i \rho_i = \frac{dM_i}{d\theta} .$$

Введение парциальной плотности  $\alpha_i \rho_i$  означает, что газ с номером  $i$  заполняет весь объем  $d\theta$  так, как будто других газов нет. С учетом этого, следуя правилам, изложенным в п.1, получим выражение для характеристик  $i$ -го газа

$$\bar{U}_i = \sum_{v=1}^{n_i} \eta_{vi} \bar{U}_{vi}, \quad (18)$$

$$\eta_{vi} = \frac{m_{vi}}{dM_i},$$

$$H_{vi} = 0,5(\bar{U}_{vi} - \bar{U}_i)^2, \quad (19)$$

$$E_i = \sum_{v=1}^{n_i} \eta_{vi} H_{vi}, \quad (20)$$

$$\varepsilon_i = 0,5\bar{U}_i^2 + E_i. \quad (21)$$

При определении давления, оказываемого на стенки объема  $d\theta$ , необходимо помнить, что смесь, а значит и стенки объема  $d\theta$ , двигаются со скоростью

$$\bar{U} = \sum_{i=1}^N \eta_i \bar{U}_i, \quad (22)$$

где

$$\eta_i = \frac{dM_i}{dM}. \quad (23)$$

Из (17) и (23) следует связь между объемной  $\alpha_i$  и массовой  $\eta_i$  концентрациями

$$\alpha_i \rho_i = \eta_i \rho.$$

Скорость  $\bar{U}$  отличается от средней скорости  $i$ -го газа  $\bar{U}_i$ , определенной уравнением (18). В результате соударения молекулы  $v_i$  со стенкой ее количество движения изменяется на величину

$$\Delta \bar{K}_{vi} = -2m_{vi}(\bar{U}_{vi} - \bar{U}),$$

Повторяя рассуждения, изложенные в п.1, получим выражение для силы, действующей на  $i$ -компонент смеси со стороны единичной площадки грани  $S_x$

$$\bar{\Phi}_{xi} = -\alpha_i \rho_i \sum_{v=1}^{n_i} \eta_{vi} (\bar{U}_{vi} - \bar{U})(U_{xvi} - U_x). \quad (24)$$

Представим разности скоростей, стоящих под знаком суммы, следующим образом

$$\bar{U}_{vi} - \bar{U} = (\bar{U}_{vi} - \bar{U}_i) + (\bar{U}_i - \bar{U}), \quad U_{xvi} - U_x = (U_{xvi} - U_{xi}) + (U_{xi} - U_x).$$

Перемножим полученные слагаемые и воспользуемся уравнениями (18), (22) и условием

$$\sum_{v=1}^{n_i} \eta_{vi} = 1.$$

В результате (24) примет вид

$$\bar{\Phi}_{xi} = -\bar{f}_{xi} + \alpha_i \bar{F}_{xi}, \quad (25)$$

где

$$\bar{f}_{xi} = \alpha_i \rho_i \sum_{v=1}^{n_i} \eta_{vi} (\bar{U}_{vi} - \bar{U}_i)(U_{xvi} - U_{xi}), \quad \bar{F}_{xi} = -\rho_i (\bar{U}_i - \bar{U})(U_{xi} - U_x). \quad (26)$$

Иными словами, тензор  $\Phi_i$  является суммой двух тензоров

$$\Phi_i = -f_i + \alpha_i F_i.$$

Тензор  $f_i$  отличается от тензора  $\varphi$  (11)-(13) для однокомпонентного газа индексом  $i$  и множителем  $\alpha_i$ . Знак минус перед  $f_i$  в выражении (25) означает, что сила  $f_i$  действует со стороны газа на стенки объема  $d\theta$ . Следуя тем же предположениям, что и в п.1, получим

$$f_i = \alpha_i P_i, \quad (27)$$

где

$$P_i = \frac{2}{3} \rho_i \sum_{v=1}^{n_i} \eta_{vi} H_{vi}, \quad (28)$$

а  $H_{vi}$  определяется выражением (19). Т.о. первая сила, с которой газ  $i$ -го компонента действует на единичную площадку, является парциальным давлением  $i$ -го компонента. Из (20) и (28) следует уравнение состояния газа

$$P_i = \frac{2}{3} \rho_i E_i. \quad (29)$$

Из теоремы Больцмана о равномерном распределении энергии между степенями свободы следует связь температуры и внутренней энергии

$$E_i = \frac{3}{2} A_i T_i, \quad (30)$$

Из (29) и (30) следует термическое уравнение состояния  $i$ -го газа

$$P_i = A_i \rho_i T_i, \quad (31)$$

На этом переход с микроуровня на макроуровень  $i$ -го газа в основном завершен. Для каждого  $i$ -го компонента смеси получены физические характеристики  $P_i$ ,  $\rho_i$ ,  $E_i$ ,  $T_i$ ,  $\bar{U}_i$ , объемная  $\alpha_i$  и массовая  $\eta_i$  концентрации. Все эти величины не содержат никакой информации о микроуровне. Получены также и уравнения состояния каждого компонента, не зависящие от того, рассматривается газ автономно или в составе смеси.

В составе смеси на  $i$ -й газ кроме силы  $-f_i$  действует еще и сила  $F_i$ , имеющая тензорный характер. Эта сила действует на газ до тех пор, пока скорость компонента  $\bar{U}_i$  отличается от скорости смеси  $\bar{U}$ . Тензор  $F_i$  назовем тензором взаимодействий. Вектор  $\bar{F}_{xi}$  (26) образован, элементами первой строки тензора  $F_i$ . Аналогично вектору  $\bar{F}_{xi}$  получается вектора  $\bar{F}_{yi}$  и  $\bar{F}_{zi}$

$$\bar{F}_{yi} = -\rho_i (\bar{U}_i - \bar{U}) (U_{yi} - U_y), \quad (32)$$

$$\bar{F}_{zi} = -\rho_i (\bar{U}_i - \bar{U}) (U_{zi} - U_z). \quad (33)$$

В течение некоторого времени сила  $F_i$  будет действовать на  $i$ -й газ так, что его скорость будет выравниваться со скоростью смеси. Этот процесс установления равновесия  $i$ -го газа со смесью по скоростям потребует некоторого времени  $\tau_u$ , которое называется временем релаксации скоростей. Процесс релаксации должен описываться системой законов сохранения – нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных.

### 3. Характеристики смеси. Макроуровень

Каждый газ характеризуется своими физическими и парциальными величинами, которые непрерывны в объеме  $d\theta$ . Парциальные плотность и давление получаются путем умножения физических плотности и давления на объемную концентрацию  $\alpha_i$ . Парциальная скорость и парциальные удельные полная и внутренняя энергии получаются после умножения физических скорости, удельных полной и внутренней энергий на массовую концентрацию  $\eta_i$ . Важно, что парциальные величины непрерывны в пространстве  $t, x, y, z$  и для них определены частные производные по  $t, x, y, z$ .

Перед тем, как написать законы сохранения  $i$ -го компонента в дифференциальной форме, отметим, что в каждой точке указанного пространства находятся все компоненты. Следовательно, они должны взаимодействовать друг с другом. Вообще говоря, компоненты находятся в неравновесном относительно друг друга состоянии, поскольку  $\bar{U}_i$ ,  $P_i$ ,  $T_i$  не обязаны совпадать с аналогичными характеристиками остальных компонентов. Разности этих величин и определяют характер их взаимодействия.

Из закона сохранения массы (первого уравнения (16)) после деления на  $d\theta$  и использования (4) и (17) следует выражение

$$\rho = \sum_{i=1}^N \alpha_i \rho_i . \quad (34)$$

Из закона сохранения количества движения (второго уравнения (16)) получается скорость смеси (22), а из закона сохранения энергии (третье уравнение (16)) после подстановки  $dQ = \varepsilon dM$ ,  $dQ_i = \varepsilon_i dM_i$  и деления на  $dM$  – выражение для удельной полной энергии смеси

$$\varepsilon = \sum_{i=1}^N \eta_i \varepsilon_i . \quad (35)$$

Полное давление, оказываемое всеми  $N$  газами на стенки объема  $d\theta$ , должно быть равно сумме сил  $f_i$ , с которыми каждый отдельный газ действует на стенки объема. Просуммировав (27), получим, что давление смеси равно сумме парциальных давлений компонентов

$$P = \sum_{i=1}^N \alpha_i P_i . \quad (36)$$

Это уравнение называется законом Дальтона. Входящие в него давления  $P_i$ , зависящие от  $\rho_i$ ,  $E_i$  или  $T_i$ , однозначно определяются уравнениями состояния (29), (31).

Рассмотрим далее зависимость между удельными внутренними энергиями смеси и компонентов. Поскольку изложенные выше преобразования, связанные с переходом с микроуровня на макроуровень являются не более, чем способом усреднения величин, то правило усреднения удельной внутренней энергии  $E$  должно быть таким же, как и правило усреднения  $\varepsilon$

$$E = \sum_{i=1}^N \eta_i E_i .$$

Сумма кинетических энергий компонентов больше кинетической энергии смеси. Обозначим эту разность через  $HdM$ . После несложных преобразований  $H$  записывается в виде

$$H = \sum_{i=1}^N 0,5 \eta_i (\bar{U}_i - \bar{U})^2 .$$

Согласно [4] скорость  $\bar{U}_i - \bar{U}$  называется диффузной скоростью  $i$ -го компонента. В случае одного идеального газа (вне смеси) при переходе с микроуровня на макроуровень неравновесная кинетическая энергия  $H$  полностью превращается во внутреннюю энергию  $E$ . В смеси при переходе с мезоуровня на макроуровень так поступить нельзя, поскольку удельные внутренние энергии компонентов и смеси в целом определены. Более того, удельная внутренняя энергия  $i$ -го компонента связана уравнением состояния с плотностью  $\rho_i$  и давлением  $P_i$ , определяемым шаровым тензором  $f_i$ . Чтобы при переходе с мезоуровня на макроуровень закон сохранения был выполнен, необходимо удельную неравновесную кинетическую энергию  $H$  включить в удельную полную энергию смеси наряду с удельной внутренней энергией  $\bar{E}$  и удельной кинетической энергией  $0,5 \bar{U}^2$

$$\varepsilon = E + 0,5 \bar{U}^2 + H .$$

Вообще говоря, смесь находится в неравновесном состоянии, т. к. давления  $P_i$ , температуры  $T_i$  и скорости  $\bar{U}_i$  у разных компонентов различны. В состоянии равновесия по  $P$ ,  $T$  и  $\bar{U}$  смесь приходит за время релаксации, причем времена релаксации  $P$ ,  $T$  и  $\bar{U}$  разные. В процессе релаксации неравновесная кинетическая энергия  $H$  переходит в  $E$ . Это является результатом работы сил взаимодействия компонентов и потоков энергии между ними. Таким образом, процесс перехода на макроуровень смеси является эволюционным в отличие от процесса перехода на мезоуровень, который является мгновенным.

Ранее было показано, что тензор  $F_i$  возникает при переходе от компонентов к смеси. По своей сути  $\alpha_i F_i$  – это сила, действующая на  $i$ -й компонент со стороны смеси. Равнодействующая этих сил с обратным знаком равна силе, с которой все компоненты действуют на смесь

$$F = - \sum_{i=1}^N \alpha_i F_i .$$

Выражения для  $\bar{F}_{xi}$ ,  $\bar{F}_{yi}$  и  $\bar{F}_{zi}$  были получены в предположении, что удар молекул о стенку является абсолютно упругим. При переходе с мезоуровня на макроуровень трактовать взаимодействие  $i$ -го компонента со стенкой как упругий удар нет оснований. В 1879 г. Максвелл рассмотрел два предельных случая взаимодействия: абсолютно упругое и диффузное, при котором кинетическая энергия в процессе взаимодействия убывает. Степень неупругости взаимодействия характеризуется коэффициентом аккомодации энергии  $\xi$  [5], который лежит в пределах  $0 \leq \xi \leq 1$ . Для учета неупругого взаимодействия введем в выражения  $\bar{F}_{xi}$ ,  $\bar{F}_{yi}$  и  $\bar{F}_{zi}$  множитель  $\xi$ .

#### 4. Взаимодействие компонентов

На микроуровне взаимодействие между молекулами понимается, как быстрое изменение величины и направления их скорости при сближении друг с другом. При изучении взаимодействия молекул ограничиваются, как правило, парными взаимодействиями. Одновременное взаимодействие трех и более молекул считается маловероятным и не рассматривается. Теория парных взаимодействий хорошо разработана [6, 7]. В [8] показано, что теория парных взаимодействий порождает в уравнениях движения и энергии  $i$ -го компонента дополнительные члены  $\bar{R}_i$  и  $\Phi_i$ , ответственные за обмен количеством движения и энергии  $i$ -го компонента с остальными. Вектор  $\bar{R}_i$  и скалярная функция  $\Phi_i$  имеют вид

$$\bar{R}_i = \sum_{j=1}^N \alpha_j \frac{a_{ij}}{\tau_{ij}^U} (\bar{U}_j - \bar{U}_i),$$

$$\Phi_i = \sum_{j=1}^N \alpha_j \left( \frac{b_{ij}}{\tau_{ij}^P} (P_j - P_i) - \frac{c_{ij}}{\tau_{ij}^T} (T_j - T_i) \right).$$

Функции  $a_{ij}$ ,  $b_{ij}$ ,  $c_{ij}$ ,  $\tau_{ij}^U$ ,  $\tau_{ij}^P$ ,  $\tau_{ij}^T$  удовлетворяют условию взаимности Онзагера в виде  $\omega_{ij} = \omega_{ji}$ , из которых следуют условия, которым удовлетворяют  $\bar{R}_i$  и  $\Phi_i$

$$\sum_{i=1}^N \alpha_i \bar{R}_i = 0, \quad \sum_{i=1}^N \alpha_i \Phi_i = 0. \quad (37)$$

Одновременно с парным взаимодействием в законы сохранения нужно ввести члены, выражающие взаимодействие  $i$ -го компонента со смесью в целом. Эти члены должны быть связаны с релаксацией неравновесной кинетической энергии  $H$  из-за действия силы  $F_i$  и потоков энергии, определяемых неравновесностью скоростей. Условия кластерного взаимодействия для потоков энергии имеют вид

$$\bar{Q} = - \sum_{i=1}^N \alpha_i \bar{Q}_i, \quad (38)$$

где  $\bar{Q}_i$  – поток энергии к  $i$ -му компоненту,  $Q$  – поток энергии к смеси. Условия кластерного взаимодействия для силы  $F_i$  запишем в виде

$$\bar{F}_k = - \sum_{i=1}^N \alpha_i \bar{F}_{ki}, \quad (39)$$

где  $k = x, y, z$ .

#### 5. Законы сохранения

В дифференциальной форме законы сохранения  $i$ -го компонента имеют вид

$$\frac{\partial \alpha_i \rho_i}{\partial t} + \nabla \alpha_i \rho_i \bar{U}_i = 0, \quad (40)$$

$$\frac{\partial \alpha_i \rho_i \bar{U}_i}{\partial t} + \nabla \alpha_i P_i + \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_k} (\alpha_i \rho_i \bar{U}_i U_{ki} + \alpha_i \bar{F}_{ki}) - \alpha_i \bar{R}_i = 0, \quad (41)$$

$$\frac{\partial \alpha_i \rho_i \varepsilon_i}{\partial t} + \nabla (\alpha_i \bar{U}_i (P_i + \rho_i \varepsilon_i) + \alpha_i \bar{Q}_i) + \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_k} (\alpha_i \bar{F}_{ki} \bar{U}_i) - \alpha_i A_i - \alpha_i \Phi_i = 0, \quad (42)$$

где  $A_i$  – работа вектора  $\bar{R}_i$ . Зависимость  $\varepsilon_i$  от  $E_i$  и  $0,5\bar{U}_i^2$  берется в виде (21), уравнение состояния – в виде (29), выражение  $\bar{F}_{ki}$  ( $k = x, y, z$ ) – в виде (26), (32), (33).

Законы сохранения смеси имеют вид

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \rho \bar{U} = 0, \quad (43)$$

$$\frac{\partial \rho \bar{U}}{\partial t} + \nabla P + \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho \bar{U} U_k + \bar{F}_k) = 0, \quad (44)$$

$$\frac{\partial \rho \varepsilon}{\partial t} + \nabla (\bar{U} (P + \rho \varepsilon) + \bar{Q}) + \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{F}_k \bar{U}) = 0, \quad (45)$$

Смесь не имеет уравнения состояния. Потребуем, чтобы уравнения (40)-(45) удовлетворяли бы двум условиям:

- Суммирование законов сохранения компонентов должно давать соответствующий закон сохранения смеси.
- Законы сохранения в виде (40)-(45) должны быть инвариантны к преобразованию Галилея.

Проверим выполнение первого условия. Просуммировав закон сохранения массы  $i$ -го компонента (40) по  $i$  от 1 до  $N$  и подставив в полученное уравнение (22) и (34) приходим к уравнению (43) – закону сохранения массы смеси.

Просуммируем закон сохранения количества движения  $i$ -го компонента (41) и вычтем закон сохранения количества движения смеси (44). Подставим в полученную разность выражения (22), (34), (36), (37) и (39). После несложных преобразований получим уравнение

$$(1 - 2\xi) \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_k} (\alpha_i \rho_i \bar{U}_i (U_{ki} - U_k)) = 0.$$

Это уравнение позволяет найти  $\xi$ , при котором сумма законов сохранения количества движения компонентов совпадает с законом сохранения количества движения смеси

$$\xi = 0,5.$$

Перейдем к закону сохранения энергии  $i$ -го компонента (42). Проверку выполнения условия совпадения начнем с преобразования уравнения (45). Подставим в него выражения  $\rho \varepsilon$  (35),  $P$  (36),  $\bar{Q}$  (38) и  $\bar{F}_k$  (39). В результате этих подстановок (45) примет вид

$$\sum_{i=1}^N \left( \frac{\partial \alpha_i \rho_i \varepsilon_i}{\partial t} + \nabla \alpha_i (P_i \bar{U} + \rho_i \varepsilon_i \bar{U} - \bar{Q}_i) - \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_k} \alpha_i \bar{F}_k \bar{U} \right) = 0. \quad (46)$$

Далее просуммируем уравнение (42) и вычтем его из (46). Полученное уравнение запишем в виде

$$\sum_{i=1}^N (A_i + B_i) = 0,$$

где

$$A_i = \nabla (\alpha_i (\bar{U} - \bar{U}_i) (P_i + \rho_i E_i) - 2\alpha_i \bar{Q}_i),$$

$$B_i = \nabla (0,5\alpha_i \rho_i \bar{U}^2 (\bar{U} - \bar{U}_i)).$$

Выражение  $\sum_{i=1}^N B_i = 0$  в силу (22), а выражение  $\sum_{i=1}^N A_i = 0$ , если потоки энергии  $\bar{Q}_i$  взять в виде

$$\bar{Q}_i = 0,5(\bar{U} - \bar{U}_i)(P_i + \rho_i E_i).$$

Таким образом, при переходе с микроуровня  $N$  газов на макроуровень смеси законы сохранения массы, количества движения и энергии строго выполнены как на этапе осреднений при переходе на мезоуровень так и на этапе релаксационных процессов установления равновесия на макроуровне.

Инвариантность уравнений (40)-(45) к преобразованию Галилея обоснована в [9].

В заключение следует подчеркнуть, что законы сохранения массы, количества движения и энергии  $i$ -го компонента в виде дифференциальных уравнений в частных производных (40)-(42) не зависят от уравнения состояния. Вместо уравнения состояния идеального газа может быть взято уравнение состояния реального газа типа Ван-дер-Ваальса или даже жидкости. Это не влияет ни на тензор  $F_i$ , ни на поток энергии  $\bar{Q}_i$ . От агрегат-



ного состояния вещества, дисперсности  $i$ -го компонента и его физических свойств зависят вектор  $\bar{R}_i$  и функция  $\Phi_i$ , которые описывают парные взаимодействия компонентов.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проекты № 07-01-96025-р-урал-а и № 07-01-00378.

#### Ссылки

1. Ландау Л.Д., Лифшиц И.М. Статическая физика. М.: Наука, 1964.
2. Френкель Я.И. Статическая физика. М., Л.: Изд. АН СССР, 1948.
3. Нигматулин Р.И. Основы механики гетерогенных сред. М.: Наука, 1978.
4. Гиршфельдер Дж., Кертис Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей. М.: ИЛ, 1964.
5. Бёрд Г. Молекулярная газовая динамика. М.: Мир, 1981. 278 с.
6. Резибуа П., Де Ленер М. Классическая кинетическая теория жидкостей и газов. М.: Мир, 1980.
7. Коган М.Н. Динамика разреженного газа. М.: Наука, 1967.
8. Струминский В.В. Механика неоднородных сред // Молекулярная газодинамика и механика неоднородных сред. Сб. трудов отделения механики АН СССР. М.: Наука, 1990. 263 с.
9. Куропатенко В.Ф. Обмен импульсом и энергией в неравновесных многокомпонентных средах // ПМТФ, 2005. Т. 46. №1. С. 7-15.