ISSN 0869-5652

Том 403, Номер 6

Август 2005

ЖУРНАЛ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

ДОКЛАДЫ АКАДЕМИИ НАУК

http://www.maik.ru

"НАУКА"

ДОКЛАДЫ АКАДЕМИИ НАУК, 2005, том 403, № 6, с.761-763

механика

УДК 532.529

Поступило 09.09.2004 г.

МОДЕЛЬ МНОГОКОМПОНЕНТНОЙ СРЕДЫ

© 2005 г. В.Ф. Куропатенко

Представлено академиком Б.В. Литвиновым 25.06.04

Модели многокомпонентных сред (МКС) в наиболее общем виде описаны в [1, 2], где сделаны утверждения, которые оказали сильное влияние на развитие моделей МКС: Выписывание балансовых уравнений сохранения в общем виде не представляет особого интереса для механики смесей, основная проблема математического моделирования многофазных смесей заключается в построении замкнутой системы уравнений при заданных физико-химических свойствах каждой фазы в отдельности и заданной структуры смеси. В последующие 20–25 лет появилось много публикаций, посвященных созданию частных моделей, основанных на тех или иных конкретизациях. В общем случае проблема получения законов сохранения смеси из законов сохранения компонентов и проблема замыкания системы уравнений *i*-го компонента оставались нерешенными до последнего времени.

ОГРАНИЧЕНИЯ

Каждый *i*-й компонент смеси из N компонентов сохраняет химические признаки вещества независимо от массы и характеризуется физическими величинами: P_i – давление, ρ_i – плотность, E_i – удельная внутренняя энергия, $\mathbf{U}_i$ - скорость, T_i – температура и т.д. Термодинамические величины удовлетворяют уравнению состояния i-го компонента. После перехода от физических величин к непрерывным в пространстве t, x_k (k=1,2,3) парциальным величинам $\alpha_i P_i$, $\alpha_i\rho_i$, $\alpha_i\rho_i\mathbf{U}_i$, $\alpha_i\rho_i E_i$ и др. каждый компонент становится сплошной средой во всем объеме, занимаемом смесью, и для него можно написать законы сохранения массы, количества движения и энергии в виде дифференциальных уравнений. Таким образом в каждой точке пространства t, x_k одновременно находятся все компоненты смеси.

Российский федеральный ядерный центр – Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики им. Е.И. Забабахина Снежинск Челябинской обл.

Для понимания сути предлагаемой модели МКС ограничимся рассмотрением идеальных сжимаемых сред без теплопроводности, химических реакций, воздействия полей и с нулевым девиатором тензора напряжений. Это не умаляет общности модели, т.к. все перечисленные физические процессы в случае необходимости добавляются в законы сохранения компонентов.

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ КОМПОНЕНТОВ

1 – й тип. Парное взаимодействие. Пусть взаимодействие компонентов i и j происходит независимо от остальных компонентов. В этом случае интенсивности потоков количества движения $\mathbf{R}_{ij}$ и энергии Φ_{ij} удовлетворяют уравнениям

$$\mathbf{R}_{ij} = -\mathbf{R}_{ji}, \quad \Phi_{ij} = -\Phi_{ji}. \tag{1}$$

Порядок индексов указывает направление взаимодействия. Умножим (1) на α_j и просуммируем по j при условии $\mathbf{R}_{ii} = 0$, $\Phi_{ii} = 0$. Результат обозначим индексом "s"

$$\sum_{j=1}^{N}\alpha_j\mathbf{R}_{ij} = \mathbf{R}_{is} = -\mathbf{R}_{si}, \qquad \sum_{j=1}^{N}\alpha_j\Phi_{ij} = \Phi_{is} = -\Phi_{si}. \tag{2}$$

Умножив (2) на α_i и просуммировав по i с учетом (1), получим

$$\sum_{i=1}^{N}\alpha_i\mathbf{R}_{is} = \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\alpha_i\alpha_j\mathbf{R}_{ij} = 0,$$
$$\sum_{i=1}^{N}\alpha_i\Phi_{is} = \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\alpha_i\alpha_j\Phi_{ij} = 0. \tag{3}$$

Величины $\mathbf{R}_{is}$ и Φ_{is} – это суммы независимых интенсивностей потоков количества движения и энергии от i-го компонента к каждому из N компонентов. Парное взаимодействие учитывается в законах сохранения i-го компонента практически во всех моделях МКС [1–4] и др.

2 - й тип. Кластерное взаимодействие. Переход к парциальным величинам $\alpha_i P_i$, $\alpha_i\rho_i$, $\alpha_i\rho_i\mathbf{U}_i$, $\alpha_i\rho_i E_i$ и др. позволяет ввести в рассмотрение

виртуальную сплошную среду (ВСС) с характеристиками

$$P=\sum_{i=1}^{N}\alpha_i P_i\,,\quad \rho=\sum_{i=1}^{N}\alpha_i\rho_i\,,\quad \rho\mathbf{U}=\sum_{i=1}^{N}\alpha_i\rho_i\mathbf{U}_i\,,$$
$$\rho E=\sum_{i=1}^{N}\alpha_i\rho_i E_i\,,\quad \rho\varepsilon=\sum_{i=1}^{N}\alpha_i\rho_i\varepsilon_i\,, \tag{4}$$

которые непрерывны в объеме, занимаемом смесью. Силы и потоки, связанные с ВСС, будем отмечать индексом "s". Смесь и ВСС являются неравновесными, если не выполнено одно из условий

$$P_i=P,\quad \mathbf{U}_i=\mathbf{U}\,,\quad T_i=T.$$

В процессе релаксации изменяются характеристики компонентов и ВСС, поскольку $\mathbf{U}$, P, ρ, E определяются уравнениями (4). Взаимодействие i-го компонента с ВСС будем называть кластерным. По аналогии с (2) силы и потоки энергии при кластерном взаимодействии связаны уравнениями

$$\mathbf{F}_{ksi}=-\mathbf{F}_{kis}\,,\quad \mathbf{Q}_{si}=-\mathbf{Q}_{is}\,,\quad \mathbf{F}_{ks}=\sum_{i=1}^{N}\alpha_i\mathbf{F}_{kis}\,,$$
$$\mathbf{Q}_s=\sum_{i=1}^{N}\alpha_i\mathbf{Q}_{is}\,. \tag{5}$$

ЗАКОНЫ СОХРАНЕНИЯ

Запишем законы сохранения i-го компонента

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_i\rho_i)+\nabla(\alpha_i\rho_i\mathbf{U}_i)=0\,, \tag{6}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_i\rho_i\mathbf{U}_i)+\frac{\partial}{\partial x_k}(\alpha_i\rho_i U_{ki}\mathbf{U}_i)+$$
$$+\nabla\alpha_i P_i+\frac{\partial}{\partial x_k}(\alpha_i\mathbf{F}_{ksi})-\alpha_i\mathbf{R}_{si}=0\,, \tag{7}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_i\rho_i\varepsilon_i)+\nabla(\alpha_i\mathbf{U}_i(P_i+\rho_i\varepsilon_i))+$$
$$+\frac{\partial}{\partial x_k}(\alpha_i\mathbf{F}_{ksi}\mathbf{U}_i)+\nabla\alpha_i\mathbf{Q}_{si}-\alpha_i\Phi_{si}-\alpha_i A_{si}=0\,, \tag{8}$$

где $A_{si}=0.5\sum_{j=1}^{N}\alpha_i\mathbf{R}_{ji}(\mathbf{U}_i+\mathbf{U}_j)$. Законы сохранения ВСС с учетом (2), (3) и (5) запишем в виде

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\rho\mathbf{U}=0\,, \tag{9}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\mathbf{U})+\frac{\partial}{\partial x_k}(\rho U_k\mathbf{U})+\nabla P+\frac{\partial}{\partial x_k}(\mathbf{F}_{ks})=0\,, \tag{10}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\varepsilon)+\nabla(\mathbf{U}(P+\rho\varepsilon))+\frac{\partial}{\partial x_k}(\mathbf{U}\mathbf{F}_{ks})+\nabla\mathbf{Q}_s=0\,. \tag{11}$$

СИЛА

Рассмотрим уравнение, полученное после подстановки (4) в (9)

$$\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_i\rho_i)+\nabla(\alpha_i\rho_i\mathbf{U}_i)\right)=0\,.$$

Каждое слагаемое в (12) равно нулю, т.к. совпадает с левой частью (6). Таким образом, суммирование (6) приводит к (9).

Подставив (2)–(5) в (10), получим

$$\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_i\rho_i\mathbf{U}_i)+\frac{\partial}{\partial x_k}(\alpha_i\rho_i U_{ki}\mathbf{U})+\right.$$
$$\left.+\nabla\alpha_i P_i-\frac{\partial}{\partial x_k}(\alpha_i\mathbf{F}_{ksi})-\alpha_i\mathbf{R}_{si}\right)=0\,. \tag{12}$$

Выберем $\mathbf{F}_{ksi}$ так, чтобы в полученной сумме каждое слагаемое в (12) совпадало с (7). После несложных преобразований получим выражение для силы $\mathbf{F}_{ksi}$

$$\mathbf{F}_{ksi}=0.5\rho_i(U_{ki}-U_k)(\mathbf{U}-\mathbf{U}_i)\,. \tag{13}$$

НЕРАВНОВЕСНАЯ КИНЕТИЧЕСКАЯ ЭНЕРГИЯ

Рассмотрим удельные полные энергии ВСС и i-го компонента

$$\varepsilon=E+0.5\mathbf{U}\mathbf{U}+H\,,\qquad \varepsilon_i=E_i+0.5\mathbf{U}_i\mathbf{U}_i\,. \tag{14}$$

Выразив из (14) E и E_i и подставив в четвертое уравнение (4), получим

$$\rho H=\sum_{i=1}^{N}\alpha_i\rho_i H_i\,, \tag{15}$$

где величина H_i определяется уравнением

$$H_i=0.5(\mathbf{U}-\mathbf{U}_i)^2\,. \tag{16}$$

Назовем ее неравновесной кинетической энергией i-го компонента.

ПОТОК ЭНЕРГИИ

Подставим (2)-(5), (13) и (15) в (11)

$$\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_i\rho_i\varepsilon_i)+\nabla\big(\alpha_i\,(\mathbf{U}(P_i+\rho_i\varepsilon_i)-\mathbf{Q}_{si})\big)-\right.$$
$$\left.-\frac{\partial}{\partial x_k}(\alpha_i\mathbf{F}_{ksi}\mathbf{U})-\alpha_i A_{si}-\alpha_i\Phi_{si}\right)=0\,. \tag{17}$$

Условие совпадения i-го слагаемого в (17) с (8), имеет вид

$$\mathbf{Q}_{si} = 0.5(P_i + \rho_i E_i)(\mathbf{U} - \mathbf{U}_i)\,. \qquad (18)$$

Потребовав равенства производства энтропии смеси суммарному производству энтропии компонентов, получим уравнение для объемной концентрации

$$P_i \frac{d_i \alpha_i}{dt} - \left(\frac{P_i}{\rho_i} + E_i\right) \nabla \alpha_i \rho_i (\mathbf{U} - \mathbf{U}_i) + \alpha_i \Omega_i = 0\,, \quad (19)$$

где $\Omega_i = \Phi_{si} + A_{si} - \mathbf{R}_{si}\mathbf{U}$. Уравнение (19) замыкает систему уравнений i-го компонента.

Новые силы $\mathbf{F}_{ksi}$ (13) и потоки энергии $\mathbf{Q}_{si}$ (18) содержат величины структурного уровня МКС (мезоуровня) с индексом i и барицентрическую скорость $\mathbf{U}$ – величину макроуровня, что типично для уравнений мезомеханики. Они обращаются в нуль при равновесии по скоростям.

Способ получения $\mathbf{F}_{ksi}$ и $\mathbf{Q}_{si}$ таков, что законы сохранения ВСС получаются суммированием законов сохранения компонентов. При выборе выражений для A_{si}, $\mathbf{F}_{ksi}$, $\mathbf{Q}_{si}$ использовалось также требование инвариантности уравнений (6)-(11) к преобразованию Галилея.

ПОЛНЫЕ УРАВНЕНИЯ МОДЕЛИ

Система уравнений, описывающих поведение i-го компонента, включает (6)-(8), второе уравнение (14), уравнения для функции α_i (19), уравнения состояния $P_i = P_i(\rho_i, E_i)$, $T_i = T_i(\rho_i, E_i)$, выражения для силы $\mathbf{F}_{ksi}$ (13) и потока $\mathbf{Q}_{si}$ (18), выражение для интенсивностей обмена импульсом $\mathbf{R}_{si}$ и энергией Φ_{si} и уравнение для U (4). Таким образом, полная система уравнений смеси содержит одинаковое количество уравнений и функций и является замкнутой без дополнительных гипотез, конкретизирующих смесь.

Работа поддержана МНТЦ, проект 1181 и РФФИ, проект 04-01-00050.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Крайко А.Н., Нигматулин Р.И., Старков В.К., Стернин Л.Б. Итоги науки и техники. Гидромеханика. 1973. Т.6. С. 93-174.
2. Нигматулин Р.И. Основы механики гетерогенных сред. М. Наука, 1978, 336 с.
3. Яненко Н.Н., Солоухин Р.И., Папырин А.Н., Фомин В.М. Сверхзвуковые двухфазные течения в условиях скоростной неравновесности частиц. Новосибирск. Наука. 1980. 158 с.
4. Куропатенко В.Ф. Математическое моделирование. 1989. т. 1, №2. С. 118-136.