

Мезомеханика однокомпонентных и многокомпонентных материалов

В.Ф. Куропатенко

Российский федеральный ядерный центр, ВНИИ технической физики, Снежинск, 456770, Россия

Последствия разрушения различных конструкций часто сопряжены с большими материальными и человеческими потерями. Для их уменьшения нужны надежные модели прогнозирования разрушения. Модели механики сплошной среды, модели макроуровня, предназначенные для прогнозирования разрушения, исчерпали свои возможности. Качественный скачок произошел благодаря развитию методов мезомеханики. В течение многих лет в триаде «дилатация, дисторсия, повороты» поворотам даже в моделях промежуточных уровней отводилась ничтожная роль. Современная мезомеханика позволила преодолеть и это заблуждение. Многоуровневые модели динамических процессов в веществах вышли далеко за рамки декрепитации и разрушения.

В работе рассматривается подход к описанию разрушения и фазовых переходов (плавление, испарение, полиморфные превращения), использующий релаксационные процессы, основанные на учете как равновесных, так и неравновесных свойств материала.

В случае многокомпонентных сред построение многоуровневых моделей, учет неравновесных процессов взаимодействия компонентов позволили решить проблему корректного перехода от микроуровня к макроуровню — от законов сохранения компонентов к законам сохранения сплошной среды.

1. Введение

Модели механики сплошной среды широко и успешно применяются во многих областях человеческой деятельности для прогнозирования поведения материалов под действием различных нагрузок. Одним из важных направлений применения моделей механики сплошной среды является прогнозирование разрушения. Последствия разрушения различных конструкций часто сопряжены с большими материальными и человеческими потерями. Поэтому к моделям разрушения предъявляются повышенные требования. Предназначенные для прогнозирования разрушения макромоделли механики сплошной среды в последнее десятилетие стали интенсивно дополняться моделями, включающими как уравнения механики сплошной среды, так и уравнения, с той или иной степенью детализации описывающие свойства материалов, проявляющиеся на микро- или мезоуровнях. Основой для развития таких моделей послужил бурный рост вычислительной техники.

2. Модели идеальных и неидеальных сред

Механика сплошной среды, как правило, оперирует со сплошными величинами, для которых можно написать уравнения с частными производными. Законы со-

хранения массы, количества движения и энергии для макровеличин без учета химических реакций и влияния полей (электромагнитных, гравитационных и др.) имеют вид:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \rho \bar{U} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \bar{U}) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho U_k \bar{U}) + \nabla P - \frac{\partial \bar{S}_k}{\partial x_k} = 0, \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \epsilon) + \nabla \bar{U} (P + \rho \epsilon) - \frac{\partial}{\partial x_k} \bar{S}_k \bar{U} = -\nabla \bar{q}. \quad (3)$$

Здесь

$$\epsilon = E + 0.5 \bar{U} \bar{U},$$

$$\bar{S}_1 = S_{11} \bar{n}_1 + \tau_{12} \bar{n}_2 + \tau_{13} \bar{n}_3,$$

$$\bar{S}_2 = \tau_{21} \bar{n}_1 + S_{22} \bar{n}_2 + \tau_{23} \bar{n}_3,$$

$$\bar{S}_3 = \tau_{31} \bar{n}_1 + \tau_{32} \bar{n}_2 + S_{33} \bar{n}_3,$$

где S_{kk} — нормальные, τ_{kl} — касательные компоненты девиатора тензора напряжений. Для твердого тела при напряжениях, меньших предела пропорциональности, S_{kl} связаны с девиатором тензора деформаций уравне-

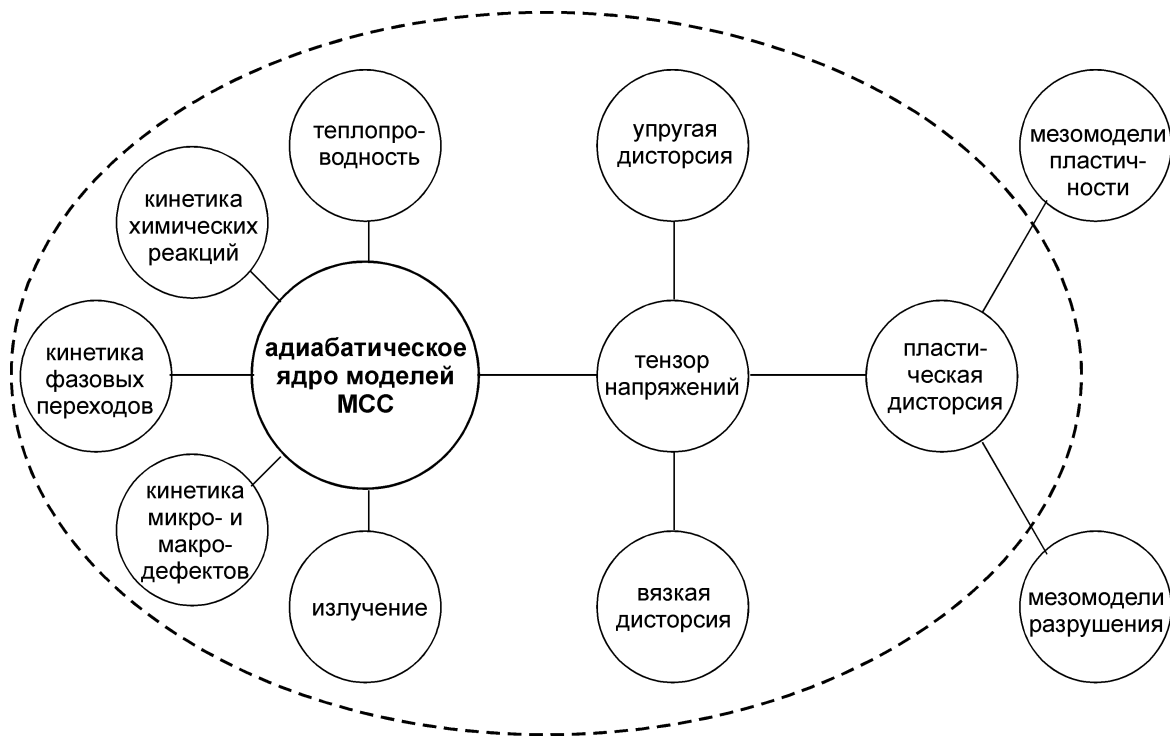


Рис. 1. Схематическое изображение ядро-оболочечной структуры моделей механики сплошной среды. В области, ограниченной пунктиром, находятся модели макроуровня

ниями упругости, а при больших напряжениях — уравнениями пластичности, включающими зависимость S_{kl} от компонентов девиатора тензора скоростей деформаций. Для вязкой жидкости S_{kl} являются компонентами девиатора тензора вязких напряжений.

Уравнения (1)–(3) замыкаются уравнениями состояния

$$P = P(\rho, E), \quad T = T(\rho, E).$$

Здесь T — температура, входящая в выражение для теплового потока

$$q = q(\rho, T, \text{grad}T).$$

Кроме того, для замыкания полученной системы уравнений необходимо добавить определяющие уравнения, связывающие \bar{S}_k с компонентами девиаторов тензоров деформации или скоростей деформаций. Поскольку $\tau_{kl} = \tau_{lk}$, то таких уравнений должно быть шесть. В результате получается замкнутая система уравнений.

Из всех возможных моделей механики сплошной среды наиболее простыми являются модели идеальной среды, в которых предполагается, что компоненты девиатора тензора напряжений пренебрежимо малы по сравнению с давлением. В приведенных уравнениях (2), (3) тензор напряжений расщеплен на шаровую часть и девиатор, поэтому при $|\bar{S}_k| \ll P$ члены тензорного ха-

рактера можно отбросить. Оставшиеся уравнения движения и энергии в виде

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \bar{U}) + \frac{\partial}{\partial x_k}(\rho U_k \bar{U}) + \nabla P = 0, \quad (4)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \epsilon) + \nabla \bar{U}(P + \rho \epsilon) = 0 \quad (5)$$

вместе с уравнением (1) описывают поведение идеальной среды и образуют адиабатическое ядро всех моделей механики сплошной среды.

Свойства идеальной среды изотропны. Она не сопротивляется сдвигам, но может проводить тепло и взаимодействовать с разными видами излучений. В области низких температур и давлений модель идеальной среды позволяет удовлетворительно описать поведение жидкостей и даже твердых тел, которые рассматриваются как конденсированное вещество. В равновесном приближении уравнение состояния позволяет описать фазовые переходы плавления и испарения, полиморфные фазовые переходы, диссоциацию и ионизацию и обратные им фазовые переходы (рис. 1).

Если ввести примитивную структуру, поделив объем между веществом и порами, то модель идеальной среды позволяет описать и поведение пористой среды.

В приближении идеальной среды может быть описано поведение многокомпонентной среды, в которой каж-

дый компонент характеризуется массовой и объемной концентрациями, которые, как и остальные величины, предполагаются непрерывными.

Модель конденсированного вещества позволяет с удовлетворительной точностью описать откольное разрушение вещества растягивающими (отрицательными) давлениями.

Законы сохранения идеальной сплошной среды выполняются на сильных, слабых и контактных разрывах, и таким образом приближение идеальности позволяет описывать ударные и детонационные волны.

Наконец, если к характеристикам сплошной среды добавить турбулентную энергию, рассматриваемую как энергию вращения вихрей, а к системе уравнений добавить уравнение производства турбулентной энергии, то такая модель идеальной среды позволяет описать как развитие, так и затухание турбулентности.

Однако возможности моделей идеальной сплошной среды ограничены, поскольку они описывают медленную или сколь угодно быструю смену только равновесных состояний. В реальных процессах скорость перестройки внутренней структуры вещества редко совпадает со скоростью изменения макроскопических характеристик среды. Следствием этого является возникновение метастабильных состояний, эволюция которых может быть описана моделями неравновесных процессов. При отказе от равновесности система законов сохранения и определяющих уравнений дополняется кинетическими уравнениями, описывающими скорость изменения концентраций исходной и новой фаз, скорость накопления микроповрежденности, скорость протекания химической реакции разложения взрывчатого вещества и т.д. Таким образом, модели идеальных равновесных сред заменяются моделями идеальных неравновесных сплошных сред.

Вторая причина отказа от использования моделей идеальной сплошной среды возникает, когда компоненты девиатора тензора напряжений сравнимы с давлением. Даже в газах возникают такие движения, когда необходимо перейти к модели неидеальной сплошной среды, включив в рассмотрение девиаторы тензоров напряжений и деформаций. В большей степени это относится к жидкостям и в полном объеме — к твердому телу.

Модели неидеальных сред принципиально отличаются от идеальных поведением энтропии. Если в идеальной среде отсутствует теплопроводность, то следствием законов сохранения является сохранение энтропии вдоль траектории каждой частицы:

$$\frac{dS}{dt} = 0. \quad (6)$$

В неидеальных же средах каждый новый физический процесс может привести к производству энтропии и к нарушению таким образом условия (6).

3. Модели твердых тел

Повышение точности математического моделирования твердых тел под действием внешних нагрузок возможно лишь при переходе к моделям неидеальной сплошной среды. В течение ряда лет успешно развивались модели, в которых пластические деформации и эволюции дефектов описывались, в основном, эмпирическими уравнениями, содержащими коэффициенты, зависящие от параметров сплошной среды (давление, температура, энергия и др.). Этого оказалось недостаточно. Поэтому появились модели, в которых поверхность текучести стала связываться со скоростью деформации. Это не дало принципиальных сдвигов в сторону повышения точности математического моделирования поведения твердого тела, поскольку все эти уравнения требовали экспериментальных данных для калибровки эмпирических констант. И только после этого они могли описывать поведение веществ, близких к тем, для которых были проведены эксперименты, и в областях изменений нагрузок, мало отличающихся от экспериментальных.

Качественный скачок в описании поведения твердых тел удалось сделать благодаря созданию и применению многоуровневых моделей. Модели разных уровней различаются временными и пространственными масштабами.

Микроуровень и макроуровень являются асимптотическими уровнями рассмотрения моделей механики. Между ними располагаются модели мезоуровня, сочетающие рассмотрение дискретного и непрерывного описания вещества. При этом, как правило, структурные элементы дискретных моделей содержат такое большое количество микрочастиц, которое достаточно для усреднений.

Работы по мезомеханике заставляют по-новому оценить роль вихрей. При этом возникает естественное разделение вихрей на вихри макро- и мезоуровня. Вихри макроуровня связаны с тензором поворотов и имеют размеры макросистемы. Вихри мезоуровня возникают при взаимодействии структурных элементов среды. Следуя [1], будем называть их «трансляционно-ротационными вихрями».

Деформация протекает на двух структурных уровнях. На макроуровне это деформация сплошной среды и ее перемещение как целого. На мезоуровне это деформация и взаимодействие структурных элементов. При этом тензор деформации структурного элемента разделяется на мезоуровне на дилатацию, дисторсию и вращение. Закон сохранения момента количества движения требует, чтобы повороты осуществлялись с помощью «роторных диполей», в которых вихри вращаются в противоположных направлениях таким образом, что сумма их роторов равна нулю, а кинетическая энергия вращения суммируется. Это энергия трансляционно-рота-

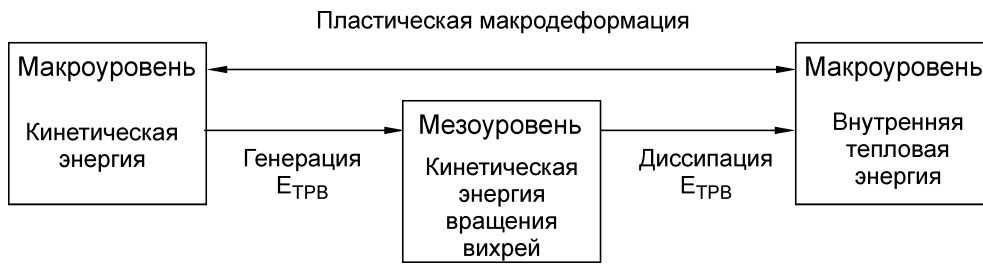


Рис. 2. Схема преобразования энергии

ционных вихрей. Обозначим ее $E_{\text{ТРВ}}$. Статистическое усреднение по размерам структурных элементов и по их энергии позволяет ввести $E_{\text{ТРВ}}$ для единичной массы вещества и на макроуровне в законе сохранения энергии рассматривать три вида энергии: кинетическую энергию поступательного движения, внутреннюю энергию и энергию мезовихрей. Для $E_{\text{ТРВ}}$ необходимо ввести уравнение производства энергии трансляционно-ротационных вихрей. В этом уравнении должны быть члены, описывающие генерацию, диссипацию и диффузию $E_{\text{ТРВ}}$. Путь превращения энергии из одного вида в другой схематически изображен на рис. 2.

Кинетическая энергия вращения вихрей в твердом теле напоминает зарождающуюся мелкомасштабную турбулентность. Вследствие сильного взаимодействия соседних структурных элементов эта энергия диссипирует за время, сравнимое со временем распространения акустического сигнала по структурному элементу, т.е. быстро. Одновременно $E_{\text{ТРВ}}$ генерируется в соседних роторных диполях. Поскольку $E_{\text{ТРВ}}$ переходит из-за диссипации в тепловую внутреннюю энергию вещества и этот процесс не связан с изменением плотности, то он возможен только при увеличении энтропии, т.к. $E = E(V, S)$.

4. Многокомпонентные среды

Уравнения многокомпонентных сред весьма сложны. В общем виде они содержат для каждого компонента шаровой тензор напряжений и его девиатор, турбулентную энергию и связанные с ней турбулентное давление и вязкость, теплопроводность и воздействие полей. Функции, описывающие обмен количеством движения и энергией, а при наличии химических реакций и массой — между компонентами, как правило, рассматриваются в виде правых частей законов сохранения. Механизмы релаксации неравновесных состояний многокомпонентных сред к равновесному состоянию изучены слабо. Остается открытым вопрос, как записать законы сохранения для сплошной среды со средними характеристиками многокомпонентных сред, чтобы они получались суммированием законов сохранения компонентов. Рассмотрим эти вопросы, следуя [2].

Законы сохранения для отдельного компонента многокомпонентной среды, занимающего только часть объема, могут быть записаны в виде дифференциальных уравнений в частных производных, если сделать параметры i -ого компонента непрерывными с помощью перехода от $\rho_i, \rho_i E_i, P_i, \rho_i \bar{U}_i, \rho_i \varepsilon_i$ к $\alpha_i \rho_i, \alpha_i \rho_i E_i, \alpha_i P_i, \alpha_i \rho_i \bar{U}_i, \alpha_i \rho_i \varepsilon_i$. В этом случае законы сохранения имеют вид

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_i \rho_i) + \nabla \alpha_i \rho_i \bar{U}_i = 0, \quad (7)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_i \rho_i \bar{U}_i) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\alpha_i \rho_i U_{ik} \bar{U}_i) + \nabla \alpha_i \Pi_i - \frac{\partial \alpha_i \bar{S}_{ik}}{\partial x_k} = \bar{R}_i, \quad (8)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_i \rho_i \varepsilon_i) + \nabla (\alpha_i \bar{U}_i (\Pi_i + \rho_i \varepsilon_i) + \alpha_i \bar{q}_i) - \frac{\partial}{\partial x_k} (\alpha_i \bar{S}_{ik} \bar{U}_i) = \Phi_i, \quad (9)$$

$$\varepsilon_i = E_i + 0.5 \bar{U}_i \bar{U}_i + \varepsilon_i^t, \quad \Pi_i = P_i + P_i^t. \quad (10)$$

Здесь ε_i^t — турбулентная энергия; P_i^t — турбулентное давление. В правые части (8) и (9) входят \bar{R}_i и Φ_i , определяющие обмен импульсом и энергией между i -ым и остальными компонентами. К уравнениям (7)–(10) добавляется уравнение производства турбулентной энергии

$$\alpha_i \rho_i \left(\frac{\partial \varepsilon_i^t}{\partial t} + U_{ik} \frac{\partial \varepsilon_i^t}{\partial x_k} \right) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\alpha_i \rho_i U_{ik}^t \frac{\partial \varepsilon_i^t}{\partial x_k} \right) + A_i - B_i + \Phi_i, \quad (11)$$

где первый член в правой части описывает диффузию турбулентной энергии; A_i — генерацию ε_i^t , B_i — диссипацию ε_i^t , Φ_i — релаксацию ε_i^t .

Система уравнений (7)–(11) замыкается уравнениями состояния компонентов

$$P_i = P_i(\rho_i, E_i), \quad T_i = T_i(\rho_i, E_i) \quad (12)$$

и выражениями для коэффициентов вязкости и потока тепла в зависимости от независимых термодинамических переменных ρ_i, E_i и от фазы, в которой находится i -ый компонент.

Система уравнений (7)–(12) является наиболее общей для описания i -ого компонента. Однако она не является замкнутой, поскольку содержит меньше уравнений, чем искомым функций. Уравнения в частных производных в общем случае для определения α_i не получены, и, таким образом, вопрос о замыкающем уравнении общего вида остается открытым. Именно по этой причине для решения конкретных задач делаются дополнительные упрощающие предположения типа равновесности либо по скоростям, либо по давлениям, либо по температурам. Возможны и другие упрощающие предположения.

Для понимания проблем многокомпонентных сред максимально упростим систему (7)–(10) и будем рассматривать смесь идеальных сред без турбулентности и тепловых потоков. При этом уравнения (8), (9) примут вид

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_i \rho_i \bar{U}_i) + \frac{\partial}{\partial x_k}(\alpha_i \rho_i U_{ik} \bar{U}_i) + \nabla \alpha_i P_i = \bar{R}_i, \quad (13)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_i \rho_i \varepsilon_i) + \nabla(\alpha_i \bar{U}_i (P_i + \rho_i \varepsilon_i)) = \Phi_i. \quad (14)$$

Система уравнений (7), (13), (14) дополняется уравнениями состояния компонентов $P_i = P_i(\rho_i, E_i)$ и уравнениями для \bar{R}_i и Φ_i . Уравнения (7), (13), (14) являются адиабатическим ядром моделей многокомпонентных сред.

Величины \bar{R}_i и Φ_i , описывающие обмен количеством движения и энергией между i -ым компонентом и остальными компонентами многокомпонентных сред, носят сугубо индивидуальный характер. В подавляющем большинстве работ \bar{R}_i и Φ_i используются в виде:

$$\bar{R}_i = \sum_{j=1}^N a_{ij}(\bar{U}_j - \bar{U}_i), \quad (15)$$

$$\Phi_i = \sum_{j=1}^N (\phi_{ij}(P_j - P_i) + \psi_{ij}(T_j - T_i)).$$

Функции $a_{ij}, \phi_{ij}, \psi_{ij}$ имеют конкретный вид, зависящий от агрегатных состояний i -ого и j -ого компонентов, размеров, формы и шероховатости поверхности частиц, механических и тепловых свойств компонентов. Поскольку $a_{ij} = a_{ji}, \phi_{ij} = \phi_{ji}, \psi_{ij} = \psi_{ji}$, то после суммирования по i величин \bar{R}_i и Φ_i получим

$$\sum_{i=1}^N \bar{R}_i = 0, \quad \sum_{i=1}^N \Phi_i = 0. \quad (16)$$

Переход от микроуровня на макроуровень, проведенный аналогично однокомпонентной среде, привел

к макроуравнениям компонентов. Но компоненты являются структурными элементами многокомпонентных сред. Иными словами, классические методы усреднения позволили перейти от структурной среды микроуровня к структурной среде мезоуровня.

Рассмотрим вопрос, при каких условиях многокомпонентная среда может быть заменена виртуальной сплошной средой, свойства которой совпадают со свойствами многокомпонентной среды и выражаются макрохарактеристиками, которые вводятся уравнениями:

$$\begin{aligned} P &= \sum_i \alpha_i P_i, \quad \rho = \sum_i \alpha_i \rho_i, \\ E &= \sum_i \eta_i E_i, \quad \bar{U} = \sum_i \eta_i \bar{U}_i. \end{aligned} \quad (17)$$

Здесь α_i — объемные; η_i — массовые концентрации, удовлетворяющие условиям $\sum_i \alpha_i = 1, \sum_i \eta_i = 1$. Из второго уравнения (17) следует уравнение, связывающее $\rho, \eta_i, \alpha_i, \rho_i$:

$$\alpha_i \rho_i = \eta_i \rho. \quad (18)$$

Средняя скорость, определяемая четвертым уравнением (17), называется барицентрической.

Поскольку уравнения состояния описывают только равновесные состояния вещества, то бессмысленно говорить об уравнении состояния многокомпонентной среды, если она находится в неравновесном состоянии при $U_i \neq U_j, P_i \neq P_j, T_i \neq T_j$ и т.д. Поэтому для определения P среды используется первое уравнение (17), а для определения T должны быть предложены некоторые эффективные приемы.

Попытки перейти от мезоуровня описания многокомпонентных сред на макроуровень виртуальных сплошных сред путем суммирования по i уравнений (7), (13), (14) предпринимались неоднократно. Следуя [3], просуммируем (7) по i :

$$\frac{\partial}{\partial t} \sum_{i=1}^N \alpha_i \rho_i + \nabla \sum_{i=1}^N \alpha_i \rho_i \bar{U}_i = 0. \quad (19)$$

Подставив (17) и (18) в (19), получим уравнение (1). Таким образом закон сохранения массы виртуальной сплошной среды получается суммированием законов сохранения масс компонентов и при этом скорость, входящая в результирующее уравнение (1), является барицентрической.

Аналогично поступим с уравнением движения (13). Принимая во внимание (16), просуммируем (13) по i :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \sum_{i=1}^N \alpha_i \rho_i \bar{U}_i + \frac{\partial}{\partial x_k} \sum_{i=1}^N \alpha_i \rho_i U_{ik} \bar{U}_i + \\ + \nabla \sum_{i=1}^N \alpha_i P_i = 0. \end{aligned} \quad (20)$$

Используя первое и третье уравнения (17) и уравнение (18), преобразуем (20) к виду

$$\frac{\partial \rho \bar{U}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} \sum_{i=1}^N \rho \eta_i U_{ik} \bar{U}_i + \nabla P = 0.$$

Добавим и вычтем $\partial(\rho U_k \bar{U})/\partial x_k$ и запишем это уравнение в виде

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho \bar{U}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} \rho U_k \bar{U} + \nabla P = \\ = \frac{\partial}{\partial x_k} \rho \sum_{i=1}^N \eta_i (U_k \bar{U} - U_{ik} \bar{U}_i). \end{aligned} \quad (21)$$

Хотя левая часть этого уравнения совпадает с уравнением движения виртуальной сплошной среды (4), правая часть содержит массовые концентрации и скорости компонентов. Она не равна нулю, и таким образом уравнение (21) остается уравнением мезоуровня.

Прежде чем перейти к суммированию уравнений энергии компонентов, уточним понятие кинетической энергии.

Кинетическая энергия многокомпонентной среды равна сумме кинетических энергий компонентов

$$K = \sum_{i=1}^N \eta_i K_i, \quad K_i = 0.5 \bar{U}_i \cdot \bar{U}_i. \quad (22)$$

Если многокомпонентная среда находится в равновесии по скоростям ($\bar{U}_i = \bar{U}$), то K равна равновесной кинетической энергии, определяемой квадратом барицентрической скорости. При отсутствии равновесия по U запишем K в виде

$$K = 0.5 \bar{U} \cdot \bar{U} + H, \quad (23)$$

где H является неравновесной добавкой кинетической энергии и определяется уравнением

$$H = \sum_i 0.5 \eta_i (\bar{U}_i \cdot \bar{U}_i - \bar{U} \cdot \bar{U}) \geq 0.$$

Полная энергия ϵ определяется выражением

$$\epsilon = E + 0.5 \bar{U} \cdot \bar{U} + H \quad (24)$$

и таким образом она отличается от энергии равновесного состояния.

Суммируя уравнение энергии (14) по i с учетом (16), получим

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \epsilon) + \nabla \sum_{i=1}^N (\rho \eta_i \epsilon_i \bar{U}_i + \alpha_i P_i \bar{U}_i) = 0. \quad (25)$$

Добавим и отнимем в (25) $\nabla \bar{U} (P + \rho \epsilon)$ и левую часть запишем так, чтобы она совпадала с (5). В результате получим

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \epsilon) + \nabla \bar{U} (P + \rho \epsilon) = \\ = \nabla (P \bar{U} - \sum_{i=1}^N \alpha_i P_i \bar{U}_i) + \nabla (\bar{U} \rho \epsilon - \rho \sum_{i=1}^N \eta_i \epsilon_i \bar{U}_i). \end{aligned} \quad (26)$$

Правая часть этого уравнения энергии не равна нулю. Она содержит характеристики компонентов, являющихся структурными элементами многокомпонентной среды. Уравнение (26), также как и уравнение (21), остается уравнением мезоуровня.

Попытки преобразования уравнений (13), (14) с целью получить в результате суммирования уравнения виртуальной сплошной среды (4), (5) длительное время оставались безрезультатными. В начале 70-х годов сформировалось широко распространенное мнение [3], что «выписывание одних только балансовых уравнений сохранения в самом общем виде не представляет особого интереса для механики смесей, так как все эти попытки приведут с точностью до обозначений к уравнениям типа (21), (26) (см. [3], стр. 105). Необходима конкретизация и определение взаимодействия и совместного деформирования фаз».

Рассмотрим внимательнее уравнение (21). В неравновесной среде, когда $U_{ik} \neq U_k$, $\bar{U}_i \neq \bar{U}$, правая часть уравнения (21) отлична от нуля. Введем обозначение

$$\bar{F}_k = 0.5 \rho \left(\sum_{i=1}^N \eta_i U_{ik} \bar{U}_i - U_k \bar{U} \right). \quad (27)$$

Сравнивая \bar{F}_k с другими членами уравнения (21), приходим к выводу, что \bar{F}_k является силой, имеющей тензорный характер и определяемой неравновесной частью H кинетической энергии. Но каждый компонент, имеющий скорость, отличную от барицентрической, должен испытывать коллективное воздействие со стороны всех других компонентов, т.е. со стороны виртуальной сплошной среды. И наоборот, виртуальная сплошная среда должна испытывать воздействие каждого компонента, движущегося со скоростью, отличной от барицентрической. Эти воздействия противоположны по направлению и равны по модулю. Следовательно,

$$\bar{F}_k = - \sum_{i=1}^N \alpha_i \bar{F}_{ik}. \quad (28)$$

Из (27) и (28) следует выражение для \bar{F}_{ik}

$$\bar{F}_{ik} = 0.5 \rho_i (U_k \bar{U} - U_{ik} \bar{U}_i). \quad (29)$$

Сила \bar{F}_{ik} действует на каждый i -ый компонент и ее действие должно быть добавлено в уравнение движения i -ого компонента. В результате закон сохранения количества движения i -ого компонента и закон сохранения количества движения виртуальной сплошной среды принимают вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_i \rho_i \bar{U}_i) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\alpha_i \rho_i U_{ik} \bar{U}_i) + \\ + \nabla \alpha_i P_i + \frac{\partial}{\partial x_k} (\alpha_i \bar{F}_{ik}) = \bar{R}_i, \end{aligned} \quad (30)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\bar{U}) + \frac{\partial}{\partial x_k}(\rho U_k \bar{U}) + \nabla P + \frac{\partial}{\partial x_k}(\bar{F}_k) = 0. \quad (31)$$

Легко показать, что уравнение (31) получается суммированием по i уравнений (30).

Действующая на каждый i -ый компонент сила \bar{F}_{ik} совершает работу, которую нужно учесть в уравнении энергии i -ого компонента. То же самое следует сказать и о силе \bar{F}_k . Однако анализ правой части уравнения (26) показывает, что она не зависит от работы сил \bar{F}_{ik} и \bar{F}_k , но зато содержит потоки энергии. Для сохранения баланса энергии соответствующий поток необходимо включить в уравнение (25), а работы сил \bar{F}_{ik} и \bar{F}_k включить в (25) и (26). В результате уравнение энергии i -ого компонента примет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_i \rho_i \varepsilon_i) + \nabla(\alpha_i \bar{U}_i (P_i + \rho_i \varepsilon_i)) + \\ + \nabla \alpha_i Q_i + \frac{\partial}{\partial x_k}(\alpha_i \bar{F}_{ik} \bar{U}_i) = \Phi_i. \end{aligned} \quad (32)$$

Потребуем, чтобы после суммирования по i закон сохранения энергии виртуальной сплошной среды имел вид

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \nabla(\bar{U}(P + \rho \varepsilon)) + \nabla Q + \frac{\partial}{\partial x_k}(\bar{F}_k \bar{U}) = 0. \quad (33)$$

Кроме того, по аналогии с (28) примем, что

$$Q = -\sum_{i=1}^N \alpha_i Q_i. \quad (34)$$

Из (32)–(34) следует выражение для ∇Q

$$\begin{aligned} \nabla Q = 0.5 \sum_{i=1}^N \left[\nabla \alpha_i \rho_i (\bar{U}_i - \bar{U}) \left(\varepsilon_i + \frac{P_i}{\rho_i} \right) + \right. \\ \left. + \frac{\partial}{\partial x_k} \alpha_i \bar{F}_{ik} (\bar{U}_i + \bar{U}) \right]. \end{aligned} \quad (35)$$

Подставим (34) в (35) и запишем полученное уравнение в виде

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N \left[\nabla \alpha_i Q_i + 0.5 \nabla \alpha_i \rho_i (\bar{U}_i - \bar{U}) \left(\varepsilon_i + \frac{P_i}{\rho_i} \right) + \right. \\ \left. + 0.5 \frac{\partial}{\partial x_k} \alpha_i \bar{F}_{ik} (\bar{U}_i + \bar{U}) \right] = 0. \end{aligned} \quad (36)$$

Поскольку число N является произвольным, то ряд (36) может быть равен нулю только в случае, когда каждое слагаемое равно нулю. Следовательно,

$$\begin{aligned} \nabla \alpha_i Q_i = -0.5 \nabla \alpha_i \rho_i (\bar{U}_i - \bar{U}) \left(\varepsilon_i + \frac{P_i}{\rho_i} \right) - \\ - 0.5 \frac{\partial}{\partial x_k} \alpha_i \bar{F}_{ik} (\bar{U}_i + \bar{U}). \end{aligned} \quad (37)$$

Легко показать, что при выбранных уравнениях (34)–(37) для потоков уравнение (33) получается суммированием уравнений (32).

Подставим (23) в (33) и запишем полученное уравнение в виде:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho (E + 0.5 \bar{U} \cdot \bar{U}) + \nabla \bar{U} (P + \rho E + 0.5 \rho \bar{U} \cdot \bar{U}) + \\ + \frac{\partial}{\partial t} (\rho H) + \nabla (\bar{U} \rho H) + \nabla Q + \frac{\partial}{\partial x_k} \bar{F}_k \bar{U} = 0. \end{aligned} \quad (38)$$

Вычтем из (38) уравнение энергии виртуальной сплошной среды (5) и умноженное на H уравнение (1). В результате получим уравнение производства неравновесной части кинетической энергии

$$\rho \frac{dH}{dt} + \frac{\partial}{\partial x_k} \bar{F}_k \bar{U} + \nabla Q = 0. \quad (39)$$

Второй и третий члены в этом уравнении могут быть найдены только на мезоуровне — на уровне многокомпонентной среды, первый же член характеризует скорость изменения избыточной кинетической энергии вдоль траектории частицы на макроуровне.

Таким образом, с помощью введения в уравнения движения и энергии компонентов универсальной силы взаимодействия i -ого компонента с многокомпонентной средой и в уравнения энергии компонентов — универсального потока энергии между i -ым компонентом и многокомпонентной средой удалось решить вопрос о получении уравнений виртуальной сплошной среды путем суммирования по i уравнений компонентов.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект № 01-01-00574.

Литература

1. Физическая мезомеханика и компьютерное конструирование материалов / Под ред. В.Е. Панина. — Новосибирск: Наука, 1995. — Т. 1. — 298 с.
2. Куропатенко В.Ф. Моделирование течений многокомпонентных сред. — Снежинск, 2000. — 21 с. / Препринт РФЯЦ-ВНИИТФ № 181.
3. Крайко А.Н., Нигматулин Р.И., Старков В.К., Стернин Л.Е. Механика многофазных сред / Итоги науки и техники. — М.: Гидродинамика, 1973. — Т. 6. — С. 93–174.