

ТЕОРИЯ СМЕСЕЙ

Куропатенко В.Ф.

*Российский Федеральный ядерный центр – ВНИИ Технической Физики им. акад.
Е.И. Забабахина
г. Снежинск*

Излагается модель многокомпонентной среды, в которой законы сохранения компонентов согласованы с законами сохранения смеси. Тензор сил кластерного взаимодействия обоснован на макро- и микроуровнях. Рассмотрены условия на сильном разрыве в многокомпонентной среде. Получено уравнение для объемной концентрации i -го компонента, замыкающее систему уравнений. Рассмотрены частные модели многокомпонентной среды.

Введение. Начало XXI века в механике сплошных сред характеризуется нарастающим несоответствием между физическими моделями и возможностями математического моделирования. Практически все модели механики сплошных сред (МСС) создаются на основе трех фундаментальных законов сохранения массы, количества движения и энергии. Свойства сплошной среды описываются уравнениями состояния вещества, а для неидеальных сред еще и определяющими уравнениями – зависимостями между компонентами девиатора тензора напряжений и компонентами девиатора тензора деформаций или скоростей деформаций.

Законы сохранения сплошных сред были установлены более 150 лет назад. Кратко напомним основные даты их открытия. В 1660 г. Р. Гук сформулировал эмпирический закон упругих деформаций – линейную зависимость напряжений от деформаций. В 1748 г. М.В. Ломоносов открыл закон сохранения массы. В 1755 г. Л. Эйлер записал в дифференциальной форме закон сохранения количества движения идеальной сплошной среды. В 1822-1847 гг. Л. Навье и Д. Стокс создали модель несжимаемой вязкой жидкости – закон сохранения массы и количества движения. В 1834 г. Б. Клапейрон и Д.И. Менделеев создали уравнение состояния идеального газа. В 1842-1847 гг. Ю. Майер, Д. Джоуль и Г. Гельмгольц сформулировали закон сохранения энергии. В 1870 г. Б. Сен-Венан опубликовал уравнения пластического течения тела. В 1873 г. И. Ван-дер-Ваальс предложил и обосновал уравнение состояния реального газа. В 1890 г. Э. Грюнайзен сформулировал уравнение состояния конденсированного вещества. Так был создан фундамент механики сплошной среды.

До середины XX столетия электронных вычислительных машин (ЭВМ) не было. Почти 100 лет развитие МСС шло по пути аналитических решений, которые, как правило, удавалось построить для упрощенных постановок задач и упрощенных свойств веществ. Ценность аналитических решений несомненна. Однако в начале XXI века их роль стала изменяться. Поскольку к 2009 г. быстродействие ЭВМ достигло 10^{15} операций в секунду, а теория численных методов МСС хорошо разработана, то аналитические решения стали широко использоваться как эталонные

решения для контроля точности методов математического моделирования. И хотя математический эксперимент все чаще стал заменять физический, успехи в этом направлении невозможны без создания моделей следующего поколения, учитывающих неоднородность сплошных сред и их реальные свойства.

Чистых веществ в природе очень мало. В основном, это смеси веществ. Вещества могут быть перемешаны как на молекулярном уровне (гомогенные смеси), так и на уровне крупных макрочастиц (гетерогенные смеси). В этих рамках располагаются практически все смеси – многокомпонентные среды. Сплошную среду в произвольном объеме называют [1] многокомпонентной (МКС), если в этом объеме перемешаны несколько ($N > 1$) веществ. Каждый компонент может находиться в любом из агрегатных состояний: Т – твердое тело, Ж – жидкость, Г – газ, П – плазма. В МКС возможны любые комбинации агрегатных состояний компонентов. Например, при $N = 2$ смесь Г+Ж – это аэрозоли, Г+Т – аэрозвеси, Ж+Ж – эмульсии, Ж+Г – пузырьковые среды, Ж+Т – суспензии, Т+Т – скальные породы, грунты, сплавы, композиционные материалы и т.д. Процессы внутри МКС возникают при любых видах воздействий: механических, тепловых, радиационных, химических, комбинированных. Поскольку разные компоненты МКС различаются теплоемкостями, скоростями звука, сжимаемостями и другими физическими характеристиками, то при внешних воздействиях МКС, как правило, приходит в неравновесное состояние, характеризующееся разными давлениями, температурами и скоростями. Стремление к повышению точности прогнозирования процессов в МКС с помощью учета этих неравновесностей и описания релаксационных процессов приводит к резкому усложнению моделей. При фазовых переходах в отдельных компонентах существенно меняется характер их взаимодействия друг с другом, что вынуждает рассматривать множество свойств, проявляющихся при парных взаимодействиях.

История создания моделей МКС началась в середине XIX века с работ Х. Дарси, Н.Е. Жуковского и И. Пригожина. Бурное развитие моделей МКС произошло в середине XX века в связи с появлением ЭВМ. В Советском Союзе большой вклад в теорию МКС внесли: Л.Д. Ландау (1945 г.), Г.Г. Черный (1951 г.), Х.А. Рахматуллин, С.С. Кутателадзе (1956 г.), В.В. Струминский, Р.И. Нигматулин (1961 г.), В.П. Мясников (1966 г.), В.Е. Накоряков (1971 г.), Н.Н. Яненко, В.М. Фомин (1976 г.). За рубежом это П.Л. Шамбре (1951 г.), Т. Каулинг, Р.А. Тупин, С. Трусделл, С. Чепмен (1956 г.), А.Е. Грин, П.Д. Келли, Ж.Р. Клигель, П.М. Нахди (1961 г.), Ж.К. Бэтчелор, Ж. Мюллер (1966 г.), Л. Вингарден (1971 г.). Это далеко не полный список показывает, что крупнейшие ученые в течение длительного времени занимались развитием моделей МКС.

Необходимость моделирования поведения МКС возникает во многих областях человеческой деятельности [2]. Это порождает возникновение различных моделей МКС, предназначенных для моделирования ее поведения при внешних воздействиях, от очень простых до очень сложных. Чаще всего простота модели достигается благодаря упрощающим гипотезам. Так, например, воздух (смесь азота, кислорода и других газов) чаще всего рассматривается как одно вещество со своим уравнением состояния (УРС). В этом случае модель МКС является наиболее простой – это классические уравнения газовой динамики. Следующими по сложности являются модели, в которых в МКС выделяются один или несколько компонентов, движущихся с одной и той же скоростью и имеющих одинаковые температуры и давления. При этом для описания перемешивания компонентов используется уравнение диффузии или уравнение фильтрации (модели Дарси, Баклея-Левретта и др. [1]), хотя применение уравнений диффузии для описания движения компонентов относительно друг

друга противоречит предположению о равенстве их скоростей.

Наиболее полными и перспективными являются модели, основанные на гипотезе взаимопроникающих взаимодействующих континуумов [1]-[6]. В классе этих моделей есть более простые и более сложные. Сложность модели зависит от сделанных упрощений. Из-за сложностей моделей в процессе упрощений при переходе от общей модели к частной могут возникать физические противоречия, аналогичные фундаментальному противоречию, заложенному в диффузионных моделях.

В настоящее время теория моделей МКС далека от своего завершения. С помощью изучения и применения частных моделей идет процесс накопления информации и опыта. Продолжают сосуществовать диффузионные модели и модели, основанные на теории многоскоростных взаимодействующих континуумов. Во всех моделях слабым местом остается описание взаимодействия компонентов. Продвижением в теории МКС является решение [6] проблемы согласования законов сохранения компонентов с законами сохранения смеси. Необходимость такого согласования привела к появлению нового типа взаимодействия компонентов – кластерного взаимодействия, не зависящего ни от агрегатных состояний компонентов, ни от их физических свойств. Ниже рассмотрим одну из современных моделей МКС.

1. Модели многоскоростных континуумов. В моделях многоскоростных континуумов поведение каждого компонента определяется законами сохранения, записанными для величин макроуровня. Это значит, что для каждого компонента уже прошел переход от рассмотрения на микроуровне к величинам макроуровня, в результате чего каждый компонент с номером i – имеет физические характеристики: P_i – давление, T_i – температуру, ρ_i – плотность, E_i – удельную внутреннюю энергию, \bar{U}_i – скорость, S_i – энтропию и др. Термодинамические характеристики i -го компонента связаны уравнением состояния.

Рассмотрим малый объем θ , в котором находится смесь N компонентов, имеющая массу M . Поделим M и θ между всеми компонентами

$$M = \sum_{i=1}^N M_i, \quad \theta = \sum_{i=1}^N \theta_i. \quad (1)$$

Отношения

$$\eta_i = \frac{M_i}{M}, \quad \alpha_i = \frac{\theta_i}{\theta} \quad (2)$$

называют [1]-[5] массовой и объемной концентрациями i -го компонента. По определению плотность – это масса вещества в единичном объеме. Следовательно

$$\rho_i = \frac{M_i}{\theta_i}, \quad \rho = \frac{M}{\theta}, \quad (3)$$

где ρ – плотность смеси. Представим, что масса M_i "размазана" на весь объем θ . Величина

$$\alpha_i \rho_i = \frac{M_i}{\theta} \quad (4)$$

является виртуальной величиной и называется парциальной плотностью i -го компонента. Из (2)-(4) видно, что $\alpha_i \rho_i$ и ρ связаны уравнением

$$\alpha_i \rho_i = \eta_i \rho. \quad (5)$$

Для удельного объема $V = 1/\rho$ соотношение (5) принимает вид

$$\alpha_i V = \eta_i V_i. \quad (6)$$

Из (1), (3) и (4) следует, что плотность смеси равна сумме парциальных плотностей компонентов

$$\rho = \sum_{i=1}^N \alpha_i \rho_i. \quad (7)$$

Каждый компонент смеси имеет количество движения $\bar{U}_i M_i$. Из закона сохранения количества движения при фиксированном времени t следует

$$\bar{U} M = \sum_{i=1}^N \bar{U}_i M_i.$$

Заменив M_i с помощью (2) на $\eta_i M$ и сократив на M , получим, что скорость смеси \bar{U} равна сумме парциальных скоростей $\eta_i \bar{U}_i$ компонентов

$$\bar{U} = \sum_{i=1}^N \eta_i \bar{U}_i. \quad (8)$$

Из (5) и (8) следует, что удельное количество движения смеси $\rho \bar{U}$ равно сумме удельных количеств движения компонентов

$$\rho \bar{U} = \sum_{i=1}^N \alpha_i \rho_i \bar{U}_i. \quad (9)$$

Скорость \bar{U} , определяемая выражением (8), называется барицентрической [1]-[2].

Удельная полная внутренняя энергия ε состоит из удельной внутренней энергии E и удельной кинетической энергии $0,5\bar{U}^2$. Аналогичная связь имеет место и для i -го компонента

$$\varepsilon = E + 0,5\bar{U}^2, \quad \varepsilon_i = E_i + 0,5\bar{U}_i^2. \quad (10)$$

Из закона сохранения энергии при фиксированном времени следует

$$\varepsilon dM = \sum_{i=1}^N \varepsilon_i dM_i.$$

После деления на dM и использования (2) получим, что удельная полная энергия смеси равна сумме парциальных удельных полных энергий компонентов

$$\varepsilon = \sum_{i=1}^N \eta_i \varepsilon_i. \quad (11)$$

Из (10) и (11) следует

$$E = \sum_{i=1}^N \eta_i (E_i + 0,5\bar{U}_i^2 - 0,5\bar{U}^2). \quad (12)$$

В процессе релаксации скоростей $\bar{U}_i \neq \bar{U}$ и т.о. удельная внутренняя энергия смеси не равна сумме парциальных внутренних энергий компонентов. Легко проверить, что выражение (12) для E не инвариантно к преобразованию Галилея. Преобразуем

выражение (12) так, чтобы оно не зависело от выбора системы координат, движущейся с постоянной скоростью. Запишем (8) в виде

$$\sum_{i=1}^N \eta_i \bar{U}^2 = \sum_{i=1}^N \eta_i (2\bar{U}_i \bar{U} - \bar{U}^2). \quad (13)$$

Подставив (13) в (12), получим выражение для E , удовлетворяющее преобразованию Галилея

$$E = \sum_{i=1}^N \eta_i (E_i + H_i), \quad (14)$$

где

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

Величину $H = \sum_{i=1}^N \eta_i H_i$ назовем неравновесной кинетической энергией смеси. В процессе релаксации скоростей при $\bar{U} - \bar{U}_i \rightarrow 0$ она переходит во внутреннюю энергию, которая т.о. возрастает.

Физические величины $P_i, \rho_i, E_i, T_i, \bar{U}_i$ и др. являются величинами макроуровня i -го компонента, а парциальные величины $\alpha_i \rho_i, \alpha_i P_i, \eta_i \bar{U}_i, \eta_i E_i, \eta_i \varepsilon_i$ и др. описывают его поведение, как сплошной среды. Но каждый компонент является структурным элементом смеси. Т.о. указанные величины по отношению к смеси, являются величинами промежуточного уровня – мезоуровня. Величины макроуровня, характеризующие поведение смеси, получаются из величин мезоуровня с помощью уравнений (7), (8), (11), (14).

2. Взаимодействия компонентов. Многокомпонентная среда может находиться в неравновесном состоянии. Условия равновесия смеси имеют вид

$$P_i = P_j, \quad T_i = T_j, \quad \bar{U}_i = \bar{U}_j.$$

Если хотя бы одно из этих условий не выполнено, смесь является неравновесной. В ней происходят релаксационные процессы установления равновесия, в которых компоненты обмениваются импульсом и энергией.

В течение длительного времени при построении моделей многокомпонентных сред рассматривали только парные взаимодействия, в процессе которых i -й и j -й компоненты взаимодействуют независимо от остальных компонентов [1-4], [7]. В случае, если $\bar{U}_i \neq \bar{U}_j$, обмен импульсом определялся чаще всего вектором

$$\bar{R}_{ij} = a_{ij}(\bar{U}_j - \bar{U}_i)/\tau_{ij}^U. \quad (15)$$

Функции a_{ij}, τ_{ij}^U зависят от степени гетерогенности смеси, от свойств i -го и j -го компонентов и от размеров частиц компонентов, от скорости звука, сжимаемости, уравнений состояния компонентов, от агрегатных состояний компонентов, их адгезионных свойств и др. так, что они удовлетворяют условию взаимности Онзагера

$$a_{ij} = a_{ji}, \quad \tau_{ij}^U = \tau_{ji}^U,$$

вследствие чего вектор \bar{R} удовлетворяет условию

$$\bar{R}_{ij} = -\bar{R}_{ji}. \quad (16)$$

Конкретный вид этих зависимостей устанавливается с учетом условий каждой конкретной задачи. Часто для их обоснования строят элементарную двухкомпонентную

ячейку. Порядок индексов ij указывает, что i -й компонент действует на j -й. Действие на i -й компонент всех N компонентов, т.е. смеси, получается суммированием по j

$$\bar{R}_i = \sum_{j=1}^N \alpha_j \bar{R}_{ji}.$$

В силу условий (16), вектор \bar{R} , действующий на смесь со стороны всех компонентов, оказывается равным нулю

$$\bar{R} = \sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^N \alpha_i \alpha_j \bar{R}_{ij} = 0. \quad (17)$$

Аналогичные рассуждения относятся и к скалярной функции Φ_{ij} , описывающей обмен энергией i -го и j -го компонентов. Как правило [4], эту функцию берут в виде

$$\Phi_{ji} = \frac{b_{ji}}{\tau_{ji}^P} (P_j - P_i) + \frac{c_{ji}}{\tau_{ji}^T} (T_j - T_i), \quad (18)$$

где

$$b_{ij} = b_{ji}, \quad c_{ij} = c_{ji}, \quad \tau_{ij}^P = \tau_{ji}^P, \quad \tau_{ij}^T = \tau_{ji}^T, \quad \Phi_{ji} = -\Phi_{ij}.$$

Поток энергии к i -му компоненту со стороны остальных компонентов смеси получается суммированием

$$\Phi_i = \sum_{j=1}^N \alpha_j \Phi_{ji}.$$

Поток энергии, действующий на смесь со стороны всех компонентов равен нулю

$$\Phi = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \alpha_i \alpha_j \Phi_{ij} = 0. \quad (19)$$

Уравнения (17), (19) – это принципиальная особенность модели парных взаимодействий.

3. Законы сохранения i -го компонента. Законы сохранения массы, импульса и энергии идеальной сплошной среды без теплопроводности запишем в виде

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_i \rho_i) + \nabla(\alpha_i \rho_i \bar{U}_i) = 0, \quad (20)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_i \rho_i \bar{U}_i) + \nabla \alpha_i P_i + \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_k} (\alpha_i \rho_i \bar{U}_i U_{ik} + \alpha_i \bar{F}_{ik}) - \alpha_i \bar{R}_i = 0, \quad (21)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_i \rho_i \varepsilon_i) + \nabla(\alpha_i \bar{U}_i (P_i + \rho_i \varepsilon_i)) + \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_k} (\alpha_i \bar{F}_{ik} \bar{U}_i) + \nabla \alpha_i \bar{Q}_i - \alpha_i \Phi_i = 0. \quad (22)$$

К системе уравнений (20)-(22) нужно добавить уравнение состояния (УРС) в виде

$$P_i = P_i(\rho_i, E_i), \quad T_i = T_i(\rho_i, E_i) \quad (23)$$

и выражение ε_i через E_i и $0,5\bar{U}_i^2$

$$\varepsilon_i = E_i + 0,5\bar{U}_i^2, \quad (24)$$

Новыми по сравнению с [1], [3]-[5] в этих уравнениях являются вектор \bar{F}_{ik} , образованный элементами k -й строки тензора F_i , и вектор \bar{Q}_i .

Уравнения (20)-(24) замыкаются уравнением для объемной концентрации α_i .

4. Законы сохранения смеси. Величины макроуровня $P, \rho, E, \bar{U}, \varepsilon, T$ являются характеристиками некоторой сплошной среды (смеси). Запишем законы сохранения массы, импульса и энергии для смеси идеальных веществ без теплопроводности. Они имеют вид

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \rho \bar{U} = 0, \quad (25)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \bar{U}) + \bar{U} \nabla(\rho \bar{U}) + \rho(\bar{U} \nabla) \bar{U} + \nabla P + \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_k} \bar{F}_k = 0, \quad (26)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \nabla \bar{U}(P + \rho \varepsilon) + \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{U} \bar{F}_k) + \nabla \bar{Q} = 0. \quad (27)$$

В рамках принятых выше гипотез уравнение состояния смеси не существует. Тензор взаимодействия F и поток энергии \bar{Q} должны быть такими, чтобы законы сохранения смеси были бы согласованы с законами сохранения компонентов, т.е. получались путем суммирования законов сохранения компонентов.

5. Уравнение для объемной концентрации. Перейдем от плотности смеси к удельному объему $V = 1/\rho$ и запишем уравнение (25) в виде

$$\frac{dV}{dt} - V \nabla \bar{U} = 0, \quad (28)$$

где производная по времени берется вдоль траектории

$$\frac{dV}{dt} = \left(\frac{\partial V}{\partial t} \right)_x + \sum_{k=1}^3 U_k \frac{\partial V}{\partial x_k}.$$

Просуммировав (6) с учетом условия $\sum_{i=1}^N \alpha_i = 1$, получим

$$V = \sum_{i=1}^N \eta_i V_i. \quad (29)$$

Подставив (8) и (29) в (28), получим

$$\sum_{i=1}^N \left(\frac{d\eta_i V_i}{dt} - V \nabla \eta_i \bar{U}_i \right) = 0.$$

Будем считать, что в этой сумме каждое слагаемое равно нулю. В полученном уравнении для характеристик i -го компонента заменим $\eta_i V_i$ на $\alpha_i V$ в соответствии с (6) и почленно продифференцируем. Тогда уравнение для i -го слагаемого примет вид

$$V \frac{d\alpha_i}{dt} + \alpha_i \frac{dV}{dt} - V \nabla \eta_i \bar{U}_i = 0.$$

Подставив в это уравнение (28) и сократив на $V \neq 0$, получим уравнение для объемной концентрации α_i

$$\frac{\partial \alpha_i}{\partial t} + \nabla (\alpha_i \bar{U} - \eta_i \bar{U}_i) = 0. \quad (30)$$

6. Необходимые условия согласованности законов сохранения. При отсутствии химических реакций законы сохранения массы i -го компонента и смеси имеют вид (20) и (25). Поскольку справедливы уравнения (7) и (9), то просуммировав (20), получим (25). Т.о. закон сохранения массы смеси получается после суммирования законов сохранения масс компонентов без каких-либо необходимых или достаточных условий.

Просуммируем по i закон сохранения количества движения i -го компонента

$$\sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial \alpha_i \rho_i \bar{U}_i}{\partial t} + \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_k} (\alpha_i \rho_i \bar{U}_i U_{ik} + \alpha_i \bar{F}_{ik}) + \nabla \alpha_i P_i \right) = 0. \quad (31)$$

С помощью уравнений (9) и уравнения

$$P = \sum_{i=1}^N \alpha_i P_i$$

преобразуем (31) к виду

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \bar{U}) + \bar{U} \nabla (\rho \bar{U}) + \rho (\bar{U} \nabla) \bar{U} + \nabla P + \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_k} \bar{F}_k + \bar{\omega}_1 = 0, \quad (32)$$

где

$$\bar{\omega}_1 = \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\sum_{i=1}^N (\alpha_i \rho_i \bar{U}_i U_{ik} + \alpha_i \bar{F}_{ik}) - \bar{F}_k - \rho \bar{U} U_k \right). \quad (33)$$

Из сравнения (32) и (26) следует необходимое условие получения закона сохранения количества движения смеси путем суммирования законов сохранения количества движения компонентов

$$\bar{\omega}_1 = 0.$$

Сила $\alpha_i \bar{F}_{ik}$ действует на i -й компонент со стороны смеси, как совокупности компонентов.

Сила \bar{F}_k – это равнодействующая сил, с которыми каждый компонент действует на смесь. Согласно третьему закону Ньютона

$$\bar{F}_k = - \sum_{i=1}^N \alpha_i \bar{F}_{ik}. \quad (34)$$

Подставив (34) в (33) и приравняв $\bar{\omega}_1$ нулю, получим уравнение

$$\sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\sum_{i=1}^N (2\alpha_i \bar{F}_{ik} + \alpha_i \rho_i \bar{U}_i U_{ik}) - \rho \bar{U} U_k \right) = 0. \quad (35)$$

С помощью (9) представим $\rho \bar{U} U_k$ в виде суммы по компонентам

$$\rho \bar{U} U_k = \sum_{i=1}^N \alpha_i \rho_i ((\bar{U}_i - \bar{U}) U_k + \bar{U} U_{ik}). \quad (36)$$

Из (35) и (36) следует уравнение

$$\sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\sum_{i=1}^N (2\alpha_i \bar{F}_{ik} + \alpha_i \rho_i (\bar{U}_i - \bar{U}) (U_{ik} - U_k)) \right) = 0.$$

Приравняв нулю каждое слагаемое в сумме по i , получим выражение для вектора \bar{F}_{ik}

$$\bar{F}_{ik} = -0,5\rho_i(\bar{U} - \bar{U}_i)(U_k - U_{ik}). \quad (37)$$

На i -й компонент со стороны смеси на площадке, ортогональной оси Ok , действует сила $\alpha_i\bar{F}_{ik}$.

Рассмотрим далее закон сохранения энергии. Просуммируем (22) по всем компонентам, добавим и отнимем величину

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

и полученное уравнение преобразуем с помощью (29), (11) и (30) к виду

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\varepsilon) + \nabla\bar{U}(P + \rho\varepsilon) + \nabla\bar{Q} + \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_k} \bar{F}_k \bar{U} + \omega_2 = 0, \quad (38)$$

где

$$\omega_2 = \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_k} (\alpha_i(P_i U_{ik} + \rho_i \varepsilon_i(U_{ik} - U_k) + Q_{ik} + \bar{F}_{ik}(\bar{U}_i + \bar{U}))) - \nabla\bar{Q}. \quad (39)$$

Из сравнения (38) с законом сохранения энергии смеси (27) видно, что необходимое условие получения закона сохранения энергии смеси путем суммирования законов сохранения энергии компонентов имеет вид $\omega_2 = 0$.

Выражение (39) содержит вектор \bar{Q} и вектора \bar{Q}_i . Вектор \bar{Q} – это поток энергии, направленный к смеси от всех компонентов, вектор $\alpha_i\bar{Q}_i$ – поток энергии направленный к i -му компоненту. Согласно закону сохранения энергии должно быть

$$\bar{Q} = -\sum_{i=1}^N \alpha_i \bar{Q}_i. \quad (40)$$

Из (10), (37), (39), (40) и условия $\bar{\omega}_2 = 0$ следует уравнение

$$\sum_{i=1}^N (\nabla(2\alpha_i \bar{Q}_i - \alpha_i(\bar{U} - \bar{U}_i)(P_i + \rho_i E_i))) = 0.$$

Приравняв нулю каждое слагаемое получим выражение для потока энергии

$$\bar{Q}_i = 0,5(\bar{U} - \bar{U}_i)(P_i + \rho_i E_i). \quad (41)$$

Рассматриваемая модель содержит новый тип взаимодействия компонентов – кластерное взаимодействие или взаимодействие каждого компонента со смесью в целом. Этот вид взаимодействия описывается универсальными силами \bar{F}_{ik} (37) и потоками энергии \bar{Q}_i (41), не зависящими ни от физических свойств компонентов, ни от их уравнений состояния. В основе модели лежат два требования – строгое выполнение законов сохранения и соблюдение инвариантности к преобразованию Галилея.

7. Молекулярно-кинетическое обоснование силы кластерного взаимодействия. Выражения для \bar{F}_{ik} и \bar{Q}_i получены на макроуровне как необходимые условия согласования законов сохранения компонентов и смеси. Получим выражение

сил \bar{F}_{ik} совершенно другим методом, применяемым для определения уравнения состояния идеального газа.

Зависимость между давлением и удельной внутренней энергией определяется в этом методе как результат взаимодействия молекул со стенками сосуда. Для перехода с уровня компонента на уровень смеси сделаем, следуя учебникам физики [10], несколько предположений:

1. Молекулы имеют массу и не имеют объема.
2. Молекулы двигаются хаотически и каждая имеет свою скорость.
3. Молекулы не взаимодействуют друг с другом, а взаимодействуют только со стенками сосуда, в котором они находятся.

Пусть каждый компонент является идеальным газом. Его молекулы имеют массу $m_{\nu i}$ и скорость $\bar{U}_{\nu i}$, где ν – номер молекулы. Масса и значения плотности ρ_i и скорости \bar{U}_i газа определяются уравнениями

$$M_i = \sum_{\nu=1}^{n_i} m_{\nu i}, \quad \rho_i = \frac{M_i}{\theta_i}, \quad \bar{U}_i = \sum_{\nu=1}^{n_i} \eta_{\nu i} \bar{U}_{\nu i}, \quad (42)$$

где $\eta_{\nu i}$ – массовая концентрация ν -й молекулы в газе i . Скорость \bar{U}_i определяет кинетическую энергию i -го компонента, которая меньше, чем полная кинетическая энергия всех n_i молекул. Их разница, деленная на M_i , определяет удельную внутреннюю энергию

$$E_i = \sum_{\nu=1}^{n_i} 0,5 \eta_{\nu i} (\bar{U}_{\nu i} - \bar{U}_i)^2. \quad (43)$$

Предполагая столкновение молекул со стенками сосуда упругим, получим, выражение силы, действующей на газ со стороны единичной площадки граней S_x, S_y, S_z , ортогональных осям Ox, Oy, Oz

$$\bar{\varphi}_{ix} = -\rho_i \sum_{\nu=1}^{n_i} \eta_{\nu i} (U_{\nu ix} - U_{ix})^2 \bar{i},$$

$$\bar{\varphi}_{iy} = -\rho_i \sum_{\nu=1}^{n_i} \eta_{\nu i} (U_{\nu iy} - U_{iy})^2 \bar{j},$$

$$\bar{\varphi}_{iz} = -\rho_i \sum_{\nu=1}^{n_i} \eta_{\nu i} (U_{\nu iz} - U_{iz})^2 \bar{k}.$$

Вектора $\bar{\varphi}_{ix}, \bar{\varphi}_{iy}, \bar{\varphi}_{iz}$ образованы диагональными элементами тензора φ . Согласно правилам механики, давление равно сумме диагональных членов с обратным знаком, деленным на три

$$P = \frac{1}{3} \rho_i \sum_{\nu=1}^{n_i} \eta_{\nu i} (\bar{U}_{\nu i} - \bar{U}_i)^2. \quad (44)$$

Исключив сумму в (43) и (44) получим классическое уравнение состояния одноатомного идеального газа i -го компонента

$$P_i = \frac{2}{3} \rho_i E_i.$$

Это уравнение верно, если газ находится в сосуде объемом θ_i и в этом сосуде других газов нет. Если же теперь перейти к объему θ , давление и плотность становятся парциальными величинами и УРС принимает вид

$$\alpha_i P_i = \frac{2}{3} \alpha_i \rho_i E_i.$$

В смеси переход с микроуровня на макроуровень является двухэтапным. Сначала совершается переход на макроуровень компонента. Это промежуточный уровень смеси – мезоуровень. Затем совершается переход с мезоуровня на макроуровень смеси. Пусть в объеме θ смеси находится N идеальных газов. Для каждого газа масса M_i , скорость \bar{U}_i и энергия E_i имеют вид (42), (43). Из законов сохранения

$$M = \sum_{i=1}^N M_i, \quad \bar{K} = \sum_{i=1}^N \bar{K}_i$$

и определений

$$\bar{K} = \bar{U} M, \quad \bar{K}_i = \bar{U}_i M_i, \quad \eta_i = M_i / M$$

следует выражение для скорости смеси (8). С этой скоростью движется объем θ и его грани. Поскольку $\bar{U}_i \neq \bar{U}$, значит компоненты двигаются внутри объема θ и взаимодействуют со стенками, ограничивающими этот объем. Для описания взаимодействия i -го компонента со стенками объема θ сделаем три предположения:

1. i -й компонент является большой частицей.
2. Взаимодействие i -го компонента с гранями S_x, S_y, S_z неупругое.
3. Изменение количества движения i -го компонента при нормальном и касательном взаимодействии со стенкой различно.

Со стороны грани S_x на i -й компонент действует сила \bar{F}_{ix} . Она имеет нормальную F_{ixx} и касательные F_{ixy}, F_{ixz} составляющие. При взаимодействии с гранью S_x нормальная U_{ix} и касательные U_{iy}, U_{iz} составляющие скорости \bar{U}_i удовлетворяют неравенствам

$$\begin{aligned} (U_{ix}^f - U_x) (U_{ix} - U_x) &< 0, \\ (U_{iy}^f - U_y) (U_{iy} - U_y) &> 0, \quad (U_{iz}^f - U_z) (U_{iz} - U_z) > 0, \end{aligned}$$

где U_{ix}, U_{iy}, U_{iz} – составляющие скорости i -го компонента до удара о стенку, U_x, U_y, U_z – составляющие скорости стенки, $U_{ix}^f, U_{iy}^f, U_{iz}^f$ – составляющие скорости i -го компонента после взаимодействия со стенкой. Ограничимся простейшим законом взаимодействия:

– при отражении

$$U_{ix}^f - U_x = -\gamma (U_{ix} - U_x), \quad (45)$$

– при касании

$$U_{iy}^f - U_y = \beta (U_{iy} - U_y), \quad U_{iz}^f - U_z = \beta (U_{iz} - U_z). \quad (46)$$

Значения γ и β изменяются в единичном промежутке $0 \leq \gamma \leq 1$, $0 \leq \beta \leq 1$. Граничные значения $\gamma = 0$, $\beta = 0$ характеризуют режим абсолютного прилипания к стенке, значения $\gamma = 1$, $\beta = 1$ характеризуют режим абсолютно упругого взаимодействия.

Силу, действующую на i -й компонент со стороны единичной площадки S_x , найдем из условия, что ее импульс за время

$$\Delta t_{ixx} = \frac{(U_{ix}^f - U_{ix}) \theta^{\frac{1}{3}}}{(U_{ix} - U_x) (U_{ix}^f - U_x)}$$

равен изменению количества движения i -го компонента при взаимодействии со стенкой

$$F_{ixx} = \frac{M_i (U_{ix}^f - U_{ix})}{\Delta t_{ixx}}.$$

Подставив в это выражение U_{ix}^f из (45), значение M_i из (4) и разделив на $\theta^{2/3}$ – площадь грани S_x , получим выражение силы F_{ixx}

$$F_{ixx} = -\gamma \alpha_i \rho_i (U_{ix} - U_x)^2.$$

Вдоль оси Oy изменение касательной составляющей количества движения равно импульсу действующей силы F_{ixy}

$$M_i (U_{iy}^f - U_{iy}) = F_{ixy} \Delta t_{ixy}. \quad (47)$$

Выражение для Δt_{ixy} написать сложно. Предположим, что Δt_{ixy} связано с Δt_{ixx} уравнением

$$\Delta t_{ixy} = R(\beta) \Delta t_{ixx}. \quad (48)$$

Подставив в (47) Δt_{ixy} из (48), значение M_i из (4), исключив U_{ix}^f , U_{iy}^f с помощью (45), (46) и разделив на $\theta^{2/3}$, получим выражение силы, действующей на i -й компонент смеси по касательной со стороны единичной площадки грани S_x за время Δt_{ixy}

$$F_{ixy} = -\alpha_i \rho_i \frac{\gamma(1-\beta)}{R(1+\gamma)} (U_{iy} - U_y) (U_{ix} - U_x).$$

Аналогично получается и выражение F_{ixz} . Вектор \bar{F}_{ix} с составляющими F_{ixx} , F_{ixy} , F_{ixz} имеет вид

$$\bar{F}_{ix} = -\gamma \alpha_i \rho_i (U_{ix} - U_x) \left((U_{ix} - U_x) \bar{i} + \frac{(1-\beta)}{R(1+\gamma)} ((U_{iy} - U_y) \bar{j} + (U_{iz} - U_z) \bar{k}) \right).$$

Аналогично получаются и вектора \bar{F}_{iy} , \bar{F}_{iz} . Параметры модели γ , β и R уточнить с помощью теории не удастся. Однако, при конкретном выборе значений этих параметров

$$\gamma = \frac{1}{2}, \quad R = \frac{2}{3} (1 - \beta)$$

выражение \bar{F}_{ik} ($k = x, y, z$) строго совпадает с полученным выше на макроуровне выражением (37).

Совершенно разные способы получения зависимости силы кластерного взаимодействия от скоростей смеси \bar{U} и i -го компонента \bar{U}_i приводят к одному и тому же результату.

8. Условия на сильном разрыве. Многочисленные экспериментальные и теоретические исследования по изучению распространения ударных волн в многокомпонентных средах [11]-[14] позволяют сделать вывод, что ударная волна в МКС не расщепляется на несколько сильных разрывов. Основываясь на этих наблюдениях будем считать, что скорость распространения сильного разрыва

$$D = \frac{dx}{dt}$$

для всех компонентов одинакова, т.е. не зависит от номера компонента.

Из механики сплошных сред известно, что на сильном разрыве скачком изменяются все термодинамические величины и нормальная составляющая скорости. Ориентируем оси Ox , Oy , Oz так, чтобы ось Ox совпадала с направлением нормали к поверхности разрыва. Запишем законы сохранения i -го компонента в одномерном приближении

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_i \rho_i) + \frac{\partial}{\partial x} (\alpha_i \rho_i U_i) &= 0, & (49) \\ \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_i \rho_i U_i) + \frac{\partial}{\partial x} (\alpha_i \rho_i U_i^2 + \alpha_i P_i + \alpha_i F_i) - \alpha_i R_i &= 0, \\ \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_i \rho_i \varepsilon_i) + \frac{\partial}{\partial x} (\alpha_i U_i (P_i + \rho_i \varepsilon_i + F_i) + \alpha_i Q_i) - \alpha_i \Phi_i &= 0, \\ \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_i) + \frac{\partial}{\partial x} (\alpha_i U - \eta_i U_i) &= 0. \end{aligned}$$

Умножим уравнение (49) на $dxdt$ и проинтегрируем по четырехугольнику высотой Δt и основанием Δx . В результате получим

$$((\alpha_i \rho_i)_+ - (\alpha_i \rho_i)_-) \Delta x + ((\alpha_i \rho_i U_i)_- - (\alpha_i \rho_i U_i)_+) \Delta t = 0. \quad (50)$$

Значком “+” обозначим величины за разрывом, значком “-” – перед разрывом. Разделим левую часть (50) на Δt и перейдем к пределу так, чтобы было

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta x}{\Delta t} = D.$$

Т.о. (50) принимает вид

$$(\alpha_i \rho_i)_+ (D - U_{i+}) - (\alpha_i \rho_i)_- (D - U_{i-}) = 0. \quad (51)$$

Аналогично получаются и остальные уравнения на поверхности сильного разрыва

$$(U_{i+} - U_{i-}) (\alpha_i \rho_i)_- (D - U_{i-}) - (\alpha_i (P_i + F_i))_+ + (\alpha_i (P_i + F_i))_- = 0, \quad (52)$$

$$\begin{aligned} &(\varepsilon_{i+} - \varepsilon_{i-}) (\alpha_i \rho_i)_- (D - U_{i-}) - \\ &- (\alpha_i (U_i (P_i + F_i) + Q_i))_+ + (\alpha_i (U_i (P_i + F_i) + Q_i))_- = 0, \end{aligned} \quad (53)$$

$$\alpha_{i+} (D - U_+) - \alpha_{i-} (D - U_-) + (\eta_i U_i)_+ - (\eta_i U_i)_- = 0. \quad (54)$$

Для замыкания системы уравнений (51)-(54) к ним нужно добавить еще ряд уравнений. Одно из них – это уравнение состояния

$$P_{i+} = P_i (\rho_{i+}, E_{i+}). \quad (55)$$

Входящая в УРС удельная внутренняя энергия E_{i+} выражается через ε_{i+} и U_{i+}

$$E_{i+} = \varepsilon_{i+} - 0,5U_{i+}^2. \quad (56)$$

Еще два уравнения – это выражения для F_{i+} и Q_{i+}

$$F_{i+} = -0,5\rho_{i+}(U_{i+} - U_+)^2, \quad (57)$$

$$Q_{i+} = 0,5(U_+ - U_{i+})(P_{i+} + \rho_{i+}E_{i+}). \quad (58)$$

Уравнение (54) содержит массовую концентрацию η_i , которая определяется уравнением

$$\eta_i = \alpha_i \rho_i / \sum_{i=1}^N \alpha_i \rho_i. \quad (59)$$

Уравнения (51)-(59) связывают физические характеристики i -го компонента за поверхностью сильного разрыва и т.о. образуют систему $9N$ уравнений, где N -число компонентов смеси. Скорость смеси U_+ связана со скоростями компонентов U_{i+} уравнением

$$U_+ = \sum_{i=1}^N \eta_i U_{i+}. \quad (60)$$

Это одно уравнение. Таким образом, условия на сильном разрыве (51)-(60) образуют систему $9N + 1$ уравнений для определения $9N + 2$ величин: $(\alpha_i, \rho_i, U_i, P_i, F_i, Q_i, \varepsilon_i, E_i, \eta_i)_+, U_+, D$.

9. Частные модели. В диффузионных моделях, как правило рассматриваются сплошная среда и примесь, имеющая массовую концентрацию η . Примесь и несущая среда движутся с одинаковой скоростью \bar{U} . В [15] приводятся уравнения неразрывности и концентрации в типичной диффузионной модели

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \rho \bar{U} = 0, \quad \rho \frac{\partial \eta}{\partial t} + \nabla \bar{J} = 0, \quad (61)$$

где \bar{J} – поток примеси

$$\bar{J} = -\rho D \nabla \eta. \quad (62)$$

Как отмечалось выше, эта модель содержит фундаментальное противоречие. Массовая концентрация примеси η может изменяться со временем только тогда, когда примесь движется относительно несущей среды, т.е. ее скорость не равна скорости смеси. Но в основе диффузионных моделей лежит гипотеза, что скорость примеси равна скорости смеси, т.е. она не движется относительно несущего компонента. В этом суть противоречия.

Рассмотренная в данной работе модель МКС содержит два уравнения неразрывности: для смеси и i -го компонента (примеси)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \rho \bar{U} = 0, \quad \frac{\partial \alpha_i \rho_i}{\partial t} + \nabla \alpha_i \rho_i \bar{U}_i = 0. \quad (63)$$

С помощью (5) запишем второе уравнение (63) в виде

$$\frac{\partial \rho \eta_i}{\partial t} + \nabla \eta_i \rho \bar{U}_i = 0. \quad (64)$$

Почленно продифференцируем (64) и $\frac{\partial \rho}{\partial t}$ заменим на $\nabla \rho \bar{U}$ с помощью (62). В результате получим

$$\rho \frac{\partial \eta_i}{\partial t} + \nabla \eta_i \rho (\bar{U}_i - \bar{U}) = 0. \quad (65)$$

Уравнение (65) совпадает со вторым уравнением (61) если

$$J = -\eta_i \rho (\bar{U} - \bar{U}_i). \quad (66)$$

Из (62) и (66) следует, что если коэффициент диффузии определить уравнением

$$D \nabla \eta_i = -\eta_i (\bar{U} - \bar{U}_i),$$

то диффузия будет описываться одинаково моделью МКС и диффузионной моделью [15]. На деле же совпадения не будет, т.к. в диффузионных моделях, как правило, D не зависит от разности скоростей.

Уравнение фильтрации Дарси [1] получается из рассмотренной модели в предположении стационарности течения. В (20) и (21) полагается

$$\frac{\partial \alpha_i \rho_i}{\partial t} = 0, \quad \frac{\partial \alpha_i \rho_i \bar{U}_i}{\partial t} = 0.$$

В (20) дополнительно предполагается

$$\alpha_i = const, \quad \rho_i = const, \quad \bar{U}_i = const.$$

После таких упрощений уравнение (21) принимает вид

$$\nabla P_i = \bar{R}_i. \quad (67)$$

Подставив в (67) выражение для \bar{R}_i (15), приходим к уравнению

$$\nabla P_i = \frac{\alpha_{ij}}{\tau_{ij}} (\bar{U}_j - \bar{U}_i),$$

являющимся основным уравнением фильтрации – так называемым, законом Дарси.

В случае $N = 1$ уравнения (20)-(22) превращаются в классические уравнения однокомпонентной сплошной среды. В случае двух компонентов модель может быть применена для моделирования нестационарных движений МКС без широко применяемых ограничений (несжимаемость, простейшие УРС и т.д.).

10. Свойства модели. Изложенная в статье модель смеси идеальных сред допускает расширение [16]. Для описания поведения твердого тела, жидкости, плазмы и др. состояний в уравнения импульса и энергии каждого компонента включаются девиатор тензора напряжений, теплопроводность, магнитное давление, Джоулево тепло и др. реальные свойства и процессы.

Компоненты девиатора тензора напряжений $\bar{S}_{ik} = S_{ik1} \bar{n}_1 + S_{ik2} \bar{n}_2 + S_{ik3} \bar{n}_3$ связаны с деформациями: упругость – законом Гука, пластичность – условиями текучести, вязкость – уравнением для вязкости. Электрические и магнитные поля определяются уравнениями Максвелла, химические реакции – уравнениями химической кинетики, разрушение – уравнением роста микроповрежденности.

Изложенная модель, является наиболее общей и физически наиболее обоснованной моделью МКС. Она содержит новые силы и потоки энергии, которые универсальны и не зависят от физических свойств или УРС компонентов. Законы сохранения

при переходе от компонентов к смеси строго выполняются. Все уравнения модели инвариантны к преобразованию Галилея. Уравнения состояния компонентов могут быть сколь угодно сложными и описывать в равновесном приближении плавление, испарение и полиморфные фазовые переходы [17].

Следует отметить, что до последнего времени в литературе не встречалось моделей многокомпонентных сред, учитывающих кластерное взаимодействие. Без учета кластерного взаимодействия во всех таких моделях законы сохранения смеси не могут быть получены суммированием соответствующих законов сохранения компонентов [4], [5].

Работа выполнена при поддержке РФФИ – гранты №07-01-00378 и №07-01-96025.

Литература

1. Нигматулин Р.И. Основы механики гетерогенных сред. М.: Наука, 1978. 332 с.
2. Куропатенко В.Ф. Модели механики сплошных сред. Челябинск: Челябинский гос. университет, 2007. 302 с.
3. Рахматуллин Х.А. Основы газодинамики взаимопроникающих движений сжимаемых сред // ПММ. 1956. Т.20, вып. 27. С.184-195.
4. Крайко А.Н., Нигматулин Р.И., Старков В.К., Стернин Л.Б. Механика многофазных сред // Итоги науки и техники. Гидромеханика. 1973. Т.6. С. 93-174.
5. 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.
6. Куропатенко В.Ф. Модель многокомпонентной среды // ДАН. 2005. Т.403, №6. С.761-763.
7. Струминский В.В. Влияние диффузной скорости на течение газовых смесей // ПММ. 1974. Т.38, вып. 2. С. 203-210.
8. Гиршфельдер Д., Кертис Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей. М.: Изд-во иностр. лит., 1961.
9. Френкель Я.И. Статистическая физика. М.: Изд-во АН СССР, 1948.
10. Радченко И.В. Молекулярная физика. М.: Наука, 1965. 479 с.
11. Николаевский В.Н. Гидродинамический анализ ударных адиабат гетерогенных смесей веществ // ПМТФ. 1969. №3. С. 82-88.
12. Дремин А.Н., Карпунин И.А. Метод определения ударных адиабат для дисперсных веществ // ПМТФ. 1960. №3.
13. Богачев Г.Н., Николаевский В.Н. Ударные волны в смеси материалов. Гидродинамические приближения // Изв. АН СССР. МЖГ. 1976. №4. С.113-125.
14. Ляхов Т.М. Волны в грунтах и пористых многокомпонентных средах. М.: Наука, 1982. 286 с.
15. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Гидродинамика. М.: Наука, 1986. 730 с.

16. Куропатенко В.Ф. Мезомеханика однокомпонентных и многокомпонентных материалов // Физическая мезомеханика. 2001. Т.4, №3. С. 49-55.
17. Куропатенко В.Ф. Уравнения состояния в математических моделях механики и физики // Экстремальные состояния вещества: Сб. науч. тр. / АН СССР. ИВТАН, 1991. С. 3-38.