Вестник Челябинского государственного университета. 2009. № 24 (162).
Физика. Вып. 5. С. 65–70.

МЕХАНИКА ЖИДКОСТИ ГАЗА И ПЛАЗМЫ

В. Ф. Куропатенко, А. А. Марченко

ОБОСНОВАНИЕ СИЛЫ КЛАСТЕРНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ КОМПОНЕНТОВ СМЕСИ*

В работе приводится обоснование на молекулярном уровне силы кластерного взаимодействия, выражение для которой было получено в [1] из соображений термодинамики. Подход, который используется для рассмотрения идеального газа в составе смеси, в случае однокомпонентного идеального газа приводит к классическому уравнению состояния, что доказывает его справедливость.

Ключевые слова: *многокомпонентные среды, взаимодействия между компонентами смеси, преобразования Галилея.*

1. Сила в кластерном взаимодействии. В [1] описывается многоскоростная модель многокомпонентной сплошной среды (МКС). Так как описываемая среда неравновесна, то, согласно [2], законы сохранения МКС должны включать в себя силы и потоки, соответствующие конкретным неравновесностям. В частности, в модель [1] была включена сила $\overrightarrow{F_{ksi}}$, действующая, в соответствии с кластерной моделью, со стороны МКС на i-й компонент, и обнуляющаяся при равновесии по скоростям. Данная сила является тензором. Выражение для $\overrightarrow{F_{ksi}}$ получено из того требования, чтобы законы сохранения смеси получались путем суммирования законов сохранения для компонентов. Согласно [1],

$$\overrightarrow{F_{ksi}} = -0,5\alpha_i\rho_i\left(U_{ki} - U_k\right)\left(\overline{U_i} - \overline{U}\right), \qquad (1)$$

где $k = x, y, z$, α_i — объемная концентрация i-го компонента; ρ_i — плотность i-го компонента; $\overrightarrow{U_i}$ — скорость i-го компонента, а

$$\overline{U} = \frac{\sum_{i=1}^{N}\alpha_i\rho_i U_i}{\sum_{i=1}^{N}\alpha_i\rho_i},$$

где N — число компонентов в смеси.

2. Однокомпонентный идеальный газ. Пусть в замкнутом сосуде кубической формы объемом V, движущемся с постоянной скоростью $\overline{U}$, находится идеальный газ.

Рассмотрим элементарный процесс взаимодействия атома газа и стенки сосуда в неподвижной системе координат, относительно которой будем указывать скорости. Пусть атом с номером ν движется от стенки сосуда W_1 со скоростью $\overline{U}_\nu$, абсолютно упруго взаимодействует со стенкой W_2 и движется обратно со скоростью $\overline{U}_\nu^c$. Рассмотрим проекцию этого движения на ось $0x$ (рис. 1).

Время этого процесса

$$\Delta t = \Delta t_1 + \Delta t_2 = \frac{V^{1/3}}{U_{\nu x} - U_x} + \frac{V^{1/3}}{U_x - U_{\nu x}^c}, \quad (2)$$

где $V^{1/3}$ — длина ребра куба; $U_{\nu x}^c = -U_{\nu x} + 2U_x$ — скорость атома после взаимодействия со стенкой W_2; U_x — проекция скорости сосуда $\overline{U}$ на ось $0x$.

Таким образом из (2):

$$\Delta t = \frac{2V^{1/3}}{U_{\nu x} - U_x}. \qquad (3)$$

Будем считать, что изменение импульса атома произошло из-за непрерывно действующей, в течение времени Δt, силы $\overrightarrow{F^{x\nu}}$, с которой площадка, перпендикулярная оси $0x$, действует на атом. Тогда по второму закону Ньютона

* Работа поддержана РФФИ, гранты № 07-01-00378, 07-01-96025.

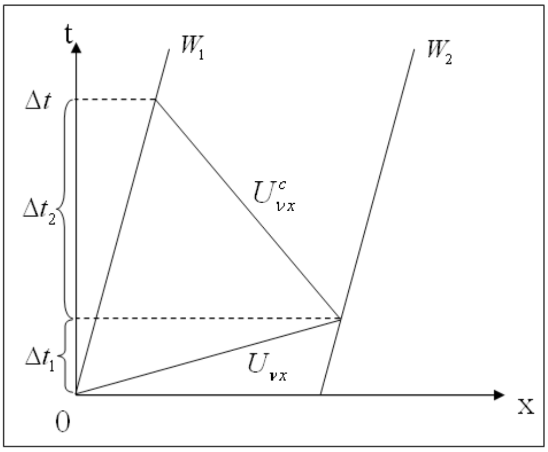

Рис. 1. Фазовая траектория движения атома с номером ν

$$m_\nu U^c_{\nu x} - m_\nu U_{\nu x} = F^{x\nu}_x \Delta t, \quad (4)$$

где m_v — масса атома; $F^{x\nu}_x$ — проекция силы $\overrightarrow{F^{x\nu}}$ на ось $0x$.

Отметим, что в рассмотренном процессе не изменились проекции скорости $\overrightarrow{U_\nu}$ на оси $0y$ и $0z$, так как взаимодействие атома со стенкой абсолютно упругое. Значит,

$$F^{x\nu}_y = F^{x\nu}_z = 0. \quad (5)$$

Суммируя (4) по всем атомам, получим

$$\sum_\nu m_\nu \left(U^c_{\nu x} - U_{\nu x}\right) = \sum_\nu F^{x\nu}_x \Delta t,$$

где Δt_v — время Δt для атома с номером v.

Отсюда, с учетом (3), получим силу, с которой площадка, перпендикулярная оси $0x$, действует на весь газ в направлении данной оси:

$$F^x_x = -\frac{1}{V^{1/3}} \sum_\nu m_\nu \left(U_x - U_{\nu x}\right)^2.$$

Разделим правую часть этого выражения на площадь стенки сосуда $V^{2/3}$ и получим полную силу, с которой единичная площадка, перпендикулярная оси $0x$, действует на газ:

$$\overrightarrow{F^x} = -\frac{1}{V} \sum_\nu m_\nu \left(U_x - U_{\nu x}\right)^2 \vec{i}.$$

Аналогично, с учетом (5)

$$\overrightarrow{F_y} = -\frac{1}{V} \sum_\nu m_\nu \left(U_y - U_{\nu y}\right)^2 \vec{j};$$

$$\overrightarrow{F_z} = -\frac{1}{\mathrm{V}} \sum_\nu m_\nu \left(U_z - U_{\nu z}\right)^2 \vec{k}.$$

Таким образом, тензор напряжений

$$F = \begin{Vmatrix} F^x_x & F^x_y & F^x_z \\ F^y_x & F^y_y & F^y_z \\ F^z_x & F^z_y & F^z_z \end{Vmatrix} =$$

$$= -\frac{1}{V} \begin{Vmatrix} \sum_\nu m_\nu \left(U_x - U_{\nu x}\right)^2 & 0 & 0 \\ 0 & \sum_\nu m_\nu \left(U_y - U_{\nu y}\right)^2 & 0 \\ 0 & 0 & \sum_\nu m_\nu \left(U_z - U_{\nu z}\right)^2 \end{Vmatrix}.$$

Как следует из правил классической механики [3], давление газа

$$P = -\frac{1}{3}\left(F^x_x + F^y_y + F^z_z\right).$$

В нашем случае

$$P = \frac{1}{3V}\left(\sum_\nu m_\nu \left(U_x - U_{\nu x}\right)^2 + \right.$$
$$\left. + \sum_\nu m_\nu \left(U_y - U_{\nu y}\right)^2 + \sum_\nu m_\nu \left(U_z - U_{\nu z}\right)^2 \right) =$$
$$= \frac{1}{3V} \sum_\nu m_\nu \left(\vec{U} - \overrightarrow{U_\nu}\right)^2.$$

Умножим и разделим правую часть на массу газа M. Получим:

$$P = \frac{\rho}{3}\sum_{\nu}\eta_{\nu}\left(\vec{U} - \vec{U_{\nu}}\right)^{2}, \qquad (6)$$

где ρ — плотность газа; η_{ν} — массовая доля атома с номером *v*.

Внутренняя энергия одноатомного газа

$$E = \sum_{\nu}\eta_{\nu}\frac{1}{2}U_{\nu}^{2} - \sum_{\nu}\eta_{\nu}\frac{1}{2}U^{2}.$$

В таком виде выражение для внутренней энергии не инвариантно к преобразованию Галилея. Легко видеть, что

$$E = \sum_{\nu}\eta_{\nu}\left(\frac{1}{2}U_{\nu}^{2} - \frac{1}{2}U^{2}\right)$$

или

$$E = \sum_{\nu}\eta_{\nu}\left(\frac{1}{2}U_{\nu}^{2} - U^{2} + \frac{1}{2}U^{2}\right),$$

а значит,

$$E = \sum_{\nu}\eta_{\nu}\frac{1}{2}U_{\nu}^{2} - \sum_{\nu}\eta_{\nu}U^{2} + \sum_{\nu}\eta_{\nu}\frac{1}{2}U^{2}.$$

Учитывая, что

$$\vec{U} = \sum_{\nu}\eta_{\nu}\vec{U_{\nu}}$$

и, следовательно,

$$\sum_{\nu}\eta_{\nu}U^{2} = U^{2}\sum_{\nu}\eta_{\nu} = U^{2} =$$
$$= \vec{U}\sum_{\nu}\eta_{\nu}\vec{U_{\nu}} = \sum_{\nu}\eta_{\nu}\vec{U_{\nu}}\vec{U},$$

имеем

$$E = \sum_{\nu}\eta_{\nu}\left(\frac{1}{2}U_{\nu}^{2} - \vec{U_{\nu}}\vec{U} + \frac{1}{2}U^{2}\right).$$

Выражение в скобках — квадрат разности $\vec{U} - \vec{U_{\nu}}$. Таким образом

$$E = \frac{1}{2}\sum_{\nu}\eta_{\nu}\left(\vec{U} - \vec{U_{\nu}}\right)^{2}.$$

Это выражение уже инвариантно относительно преобразования Галилея.

Принимая во внимание (6), получим уравнение, связывающее *P* и *E*:

$$P = \frac{2}{3}\rho E.$$

Данное уравнение совпадает с классическим уравнением состояния идеального газа.

3. Смесь идеальных газов. Пусть в замкнутом сосуде кубической формы объемом *V*, движущемся с постоянной скоростью $\vec{U}$, находится смесь, состоящая из *N* идеальных

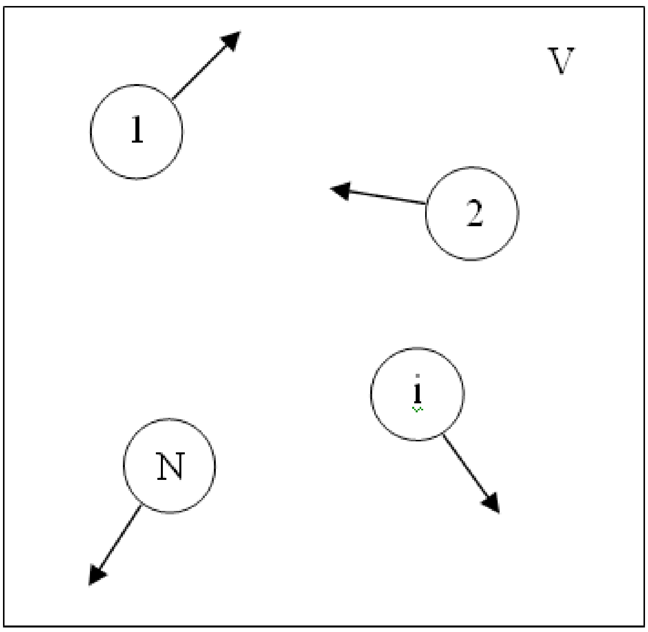

Рис. 2. Компоненты смеси идеальных газов

газов. Будем считать каждый компонент частицей, движущейся в сосуде (рис. 2). Все частицы движутся с различными скоростями $\overrightarrow{U_i}$, $i = 1, 2, \ldots, N$, отличными от $\vec{U}$. Таким образом, рассматриваемая модель — многоскоростная.

По аналогии с однокомпонентным газом будем рассматривать элементарное взаимодействие компонента-частицы (далее просто частицы) со стенкой сосуда в неподвижной системе координат. В данном случае характер этого взаимодействия заранее неизвестен.

Пусть частица движется к стенке, перпендикулярной оси $0x$ $0x$, соударяется с ней и движется обратно (рис. 3).

Используя те же обозначения, что и в первом случае, имеем по аналогии с (2) для Δt:

$$\Delta t = \Delta t_1 + \Delta t_2 = \frac{V^{1/3}}{U_{ix} - U_x} + \frac{V^{1/3}}{U_x - U_{ix}^c}, \quad (7)$$

где U_{ix} — проекция скорости $\overrightarrow{U_i}$ частицы с номером i на ось $0x$ до взаимодействия со стенкой; U_{ix}^c — скорость после взаимодействия.

Предположим, что частица соударяется со стенкой неупруго, причем будем выделять различные составляющие взаимодействия: нормальную и касательную. В данном случае учитываем только нормальную составляющую, и скорость U_{ix}^c найдем из условия

$$U_{ix}^c - U_x = -\gamma(U_{ix} - U_x),$$

где γ — коэффициент нормального взаимодействия; $0 < \gamma < 1$. При $\gamma = 0$ взаимодействие абсолютно упругое, при $\gamma = 1$ — абсолютно неупругое (частица «прилипает» к стенке). Здесь знак минус обусловлен тем, что при нормальном соударении частица меняет направление своего движения вдоль оси $0x$.

Таким образом:

$$U_{ix}^c = (1 + \gamma)U_x - \gamma U_{ix}. \quad (8)$$

Отсюда, с учетом (7), имеем

$$\Delta t = \frac{(\gamma + 1)V^{1/3}}{\gamma} \frac{1}{U_{ix} - U_x}. \quad (9)$$

По аналогии с однокомпонентным газом предположим, что со стороны площадки, перпендикулярной оси $0x$, на частицу с номером i непрерывно в течение времени Δt действует сила $\overrightarrow{F^{xi}}$. Тогда по второму закону Ньютона

$$M_i\left(U_{ix}^c - U_{ix}\right) = F_x^{xi}\Delta t,$$

где M_i — масса частицы i; F_x^{xi} — проекция силы $\overrightarrow{F^{xi}}$ на ось $0x$.

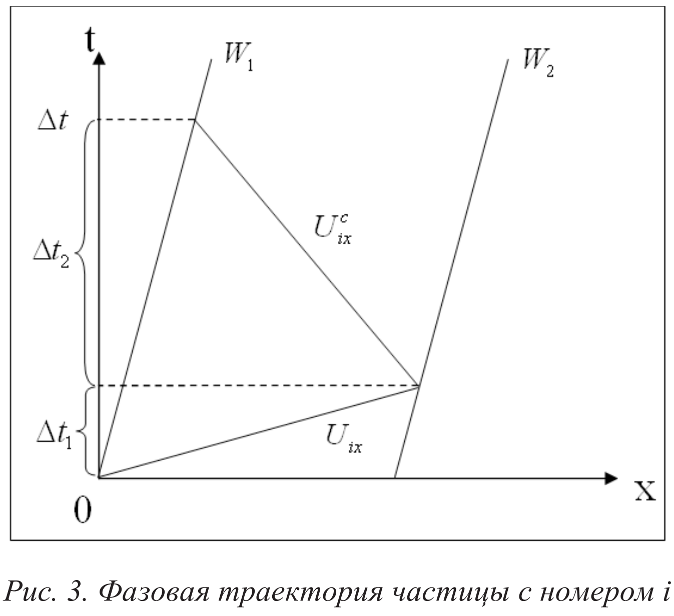

Рис. 3. Фазовая траектория частицы с номером i

С учетом (8) и (9):

$$F_x^{xi} = -\gamma \frac{M_i}{V^{1/3}} \left(U_x - U_{ix}\right)^2 .$$

Чтобы получить силу, действующую со стороны единичной площадки, разделим правую часть на $V^{2/3}$. Принимая во внимание, что отношение

$$\frac{M_i}{V} = \alpha_i \rho_i , \quad (10)$$

где α_i — объемная концентрация i-го частицы; ρ_i — плотность i-й частицы, получим:

$$F_x^{xi} = -\gamma \alpha_i \rho_i \left(U_x - U_{ix}\right)^2 .$$

Так как взаимодействие частицы со стенкой неупругое, то величины F_y^{xi} и F_z^{xi} отличны от нуля. Найдем эти величины.

Пусть частица летит от стенки W_1^y, перпендикулярной оси 0*x*, соударяется со стенкой W_2 и долетает до противоположной стенки W_2^y. При этом изменение проекции скорости частицы на ось 0*y* происходит согласно уравнению для касательной составляющей неупругого взаимодействия:

$$U_{iy}^c - U_y = \beta \left(U_{iy} - U_y\right), \quad (11)$$

где U_{iy} — скорость частицы до соударения со стенкой W_2; U_{iy}^c — скорость частицы после соударения; U_y — проекция скорости сосуда $\vec{U}$ на ось 0*y*; β — коэффициент касательного взаимодействия, $0 < \beta < 1$. При $\beta = 0$ взаимодействие абсолютно упругое, при $\beta = 1$ — абсолютно неупругое. Так как при касательном соударении частица не меняет направление своего движения вдоль оси 0*y*, знак минуса в правой части отсутствует.

Для вычисления F_y^{xi} необходимо знать время Δt^y пролета частицы от стенки W_1^y до стенки W_2^y, но это связано с значительными трудностями, поэтому введем упрощающее предположение: пусть время Δt^y пропорционально времени Δt, причем коэффициент пропорциональности является функцией от γ и β:

$$\Delta t^y = f\left(\gamma, \beta\right) \Delta t. \quad (12)$$

Тогда, учитывая (9), получим

$$\Delta t^y = f\left(\gamma, \beta\right) \frac{\left(\gamma + 1\right) V^{1/3}}{\gamma} \frac{1}{U_{ix} - U_x} . \quad (13)$$

По второму закону Ньютона

$$M_i \left(U_{iy}^c - U_{iy}\right) = F_y^{xi} \Delta t^y .$$

Отсюда, используя (11) и (13), найдем

$$F_y^{xi} = -\frac{\gamma \left(1 - \beta\right)}{f\left(\gamma, \beta\right)\left(\gamma + 1\right)} \times \frac{M_i}{V^{1/3}} \left(U_{ix} - U_x\right)\left(U_{iy} - U_y\right).$$

Разделив правую часть на площадь стенки $V^{2/3}$ и учитывая (10), получим:

$$F_y^{xi} = -\frac{\gamma \left(1 - \beta\right)}{f\left(\gamma, \beta\right)\left(\gamma + 1\right)} \times \alpha_i \rho_i \left(U_{ix} - U_x\right)\left(U_{iy} - U_y\right). \quad (14)$$

Пусть касательное взаимодействие частицы и стенки W_2 при движении частицы вдоль оси 0*z* подчиняется законам (11) и (12). Тогда, по аналогии с (14), получим:

$$F_z^{xi} = -\frac{\gamma \left(1 - \beta\right)}{f\left(\gamma, \beta\right)\left(\gamma + 1\right)} \times \alpha_i \rho_i \left(U_{ix} - U_x\right)\left(U_{iz} - U_z\right).$$

Таким образом, полная сила, с которой единичная площадка, перпендикулярная оси 0*x* действует на частицу *i*

$$\overrightarrow{F^{xi}} = -\gamma\alpha_i\rho_i\left(U_{ix} - U_x\right)\times$$
$$\times\left[\left(U_{ix} - U_x\right)\vec{i} + \frac{(1-\beta)}{f(\gamma,\beta)(\gamma+1)}\times\right.$$
$$\times\left(U_{iy} - U_y\right)\vec{j} + \frac{(1-\beta)}{f(\gamma,\beta)(\gamma+1)}\times$$
$$\left.\times\left(U_{iz} - U_z\right)\vec{k}\right].$$

Аналогично получаем:

$$\overrightarrow{F^{yi}} = -\gamma\alpha_i\rho_i\left(U_{iy} - U_y\right)\times$$
$$\times\left[\frac{(1-\beta)}{f(\gamma,\beta)(\gamma+1)}\left(U_{ix} - U_x\right)\vec{i} +\right.$$
$$+\left(U_{iy} - U_y\right)\vec{j} + \frac{(1-\beta)}{f(\gamma,\beta)(\gamma+1)}\times$$
$$\left.\times\left(U_{iz} - U_z\right)\vec{k}\right],$$

$$\overrightarrow{F^{zi}} = -\gamma\alpha_i\rho_i\left(U_{iz} - U_z\right)\times$$
$$\times\left[\frac{(1-\beta)}{f(\gamma,\beta)(\gamma+1)}\left(U_{ix} - U_x\right)\vec{i} +\right.$$
$$+\frac{(1-\beta)}{f(\gamma,\beta)(\gamma+1)}\left(U_{iy} - U_y\right)\vec{j} +$$
$$\left.+\left(U_{iz} - U_z\right)\vec{k}\right].$$

Легко видеть, что полученные выражения совпадают с выражением (1) при значениях

$$\gamma = \frac{1}{2},$$
$$0 < \beta < 1,$$
$$f(\gamma,\beta) = \frac{(1-\beta)}{(\gamma+1)} = \frac{2}{3}(1-\beta),\quad 0 < \beta < 1$$

и обнуляются при равновесии по скоростям.

Список литературы

1. Куропатенко, В. Ф. Модель многокомпонентной среды // Докл. АН. 2005. Т. 403, № 6. С. 761–763.

2. Де Гроот, С. Р. Термодинамика необратимых процессов. М. : Гостехтеориздат, 1956.

3. Куропатенко, В. Ф. Модели механики сплошных сред : монография. Челябинск, 2007.