

УДК 532.529

В. Ф. Куропатенко

НОВЫЕ МОДЕЛИ МЕХАНИКИ СПЛОШНЫХ СРЕД

Рассматриваются возможные пути перехода от традиционных моделей механики сплошных сред к моделям нового поколения на примере модели многокомпонентной среды.

Ключевые слова: законы сохранения, сплошная среда, дифференциальные уравнения, смесь, компонент, концентрация, взаимодействие компонентов, частицы.

Введение. Модели механики сплошных сред, широко применяемые для решения различных задач физики, химии и технологии, содержат, как правило, упрощающие гипотезы и эмпирические параметры. Это позволило разделить единую науку — механику сплошной среды (МСС) на направления (газовую динамику, гидродинамику, теорию упругости, теорию пластичности, теорию плазмы), в каждом из которых для отыскания решений формулируются дополнительные упрощающие гипотезы и применяются оригинальные методы. Хотя такой подход оказался весьма эффективным для построения аналитических решений, применение основанных на упрощающих гипотезах моделей МСС для математического моделирования сложных динамических процессов не позволяет в полной мере использовать возможности вычислительной техники XXI века. Точность моделей МСС приблизилась к своему пределу. Возникла необходимость в создании моделей МСС нового поколения. Все модели МСС основаны на трех законах сохранения массы, количества движения и энергии. Они записываются в виде дифференциальных уравнений в частных производных для сплошной среды, которая в течение нескольких веков рассматривалась как материальная субстанция, непрерывным образом заполняющая рассматриваемый объем пространства. Законы сохранения сплошных сред были сформулированы в период с 1640 г. по 1900 г. Кратко напомним основные даты их открытия. В 1660 г. Р. Гук (R. Hooke) 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 (L. Navier) и Д. Стокс (G. Stokes) создали модель несжимаемой вязкой жидкости — закон сохранения массы и количества движения. В 1842–1847 гг. Ю. Майер (J. Mayer), Д. Джоуль (J. Joyle) и Г. Гельмгольц (G. Helmholtz) сформулировали закон сохранения энергии. В 1870 г. Б. Сен-Венан (B. Saint-Venant) опубликовал уравнения пластического течения тела. Определяющие уравнения, описывающие зависимости между тензором напряжений и тензором деформаций, создавались в те же годы, что и законы сохранения. В области низких давлений удовлетворяющие промышленность результаты давала модель несжимаемой жидкости и упруго-пластическая модель твердого тела, в области газовых состояний применялось простейшее уравнение состояния идеального газа.

До середины XX столетия развитие МСС шло по пути построения аналитических решений, как правило, для упрощенных постановок задач и упрощенных свойств веществ. Ценность аналитических решений несомненна. Однако в начале XXI века их роль стала изменяться. Поскольку к 2010 г. быстродействие электронных вычислительных машин (ЭВМ) достигло 10^{15} операций в секунду, а теория численных методов МСС хорошо разработана, аналитические решения стали широко использоваться как эталонные решения для контроля точности методов математического моделирования. Несмотря на то, что физический эксперимент все чаще стал заменяться математическим, успехи в этом направлении невозможны без создания моделей нового поколения, учитывающих неоднородность и реальные свойства веществ.

Атомно-молекулярные теории строения материи сформировались заметно позднее основных уравнений механики, хотя догадки о существовании микрочастиц высказывались философами еще до нашей эры. Реальный же шаг был сделан в 1803 г., когда Д. Дальтон (J. Dalton) ввел понятие атомного веса и составил таблицу атомных весов элементов. Следующее важнейшее открытие было сделано в 1869 г. Д. Менделеевым, создавшим периодическую таблицу элементов. Наконец, в 1903 г. Д. Томсоном (G. Thomson) была создана электронная модель атома. Таким образом, вещество стало рассматриваться на двух уровнях. На макроуровне — это сплошная среда, на микроуровне — это совокупность микрочастиц. Однако комплексного использования моделей

Российский Федеральный ядерный центр — ВНИИ технической физики им. акад. Е. И. Забабахина. 454770, г. Снежинск, Челябинская обл., а/я 245; э-почта: v.f.kuropatenko@gambler.ru. Поступила 29.05.2010.

макро- и микроуровней долгие годы не происходило. В течение всего XX века микромоделли использовались в основном для построения и повышения точности уравнений состояния вещества, которые замыкают систему законов сохранения сплошной среды.

Согласно современным взглядам, понятие сплошной среды является не более чем математической абстракцией. Любое тело — жидкость, газ, твердое тело, плазма, состоит из микрочастиц (молекулы, атомы, электроны, ионы и т. д.), каждая из которых имеет свою массу, скорость и внутреннюю энергию. Если это многоатомная молекула, то ее внутренняя энергия складывается из энергии ее образования, энергии каждого из входящих в нее атомов, пропорциональной энергии связи электронов со "своим" ядром, энергии ядра, определяемой энергией связи нуклонов, образующих ядро атома. Разумеется, совокупность микрочастиц является дискретной средой. Моделирование дискретной среды на микроуровне не по силам даже современной вычислительной технике из-за огромной плотности микрочастиц (в 1 см³ воздуха находится примерно 3 · 10¹⁹ молекул) и из-за невозможности в силу принципа неопределенности указать точные начальные данные для каждой частицы в некоторый фиксированный момент времени. Именно по указанным выше причинам во второй половине XX века предпринимались попытки создать модели, сочетающие в себе элементы сплошной среды с элементами микромоделей.

Связь микрочастиц со сплошной средой. Сплошная среда характеризуется массой M , количеством движения K , энергией Q_0 . Эти величины непрерывны в четырехмерном пространстве x, y, z, t . Частные производные параметров M, K и Q_0 по объему при постоянном времени t определяют плотность ρ , скорость U и удельную энергию ϵ среды:

$$\rho = \left(\frac{\partial M}{\partial \theta} \right)_t, \quad \rho U = \left(\frac{\partial K}{\partial \theta} \right)_t, \quad \rho \epsilon = \left(\frac{\partial Q_0}{\partial \theta} \right)_t.$$

Непрерывность этих величин позволяет в свою очередь определить их частные производные по пространственным переменным и по времени и записать законы сохранения в виде дифференциальных уравнений в частных производных. Для максимального облегчения понимания основных идей ограничимся рассмотрением только адиабатического ядра [1] законов сохранения в виде

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \rho U = 0, \tag{1}$$

$$\frac{\partial \rho U}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho U U_k) + \nabla P = 0, \tag{2}$$

$$\frac{\partial \rho \epsilon}{\partial t} + \nabla U (\rho \epsilon + P) = 0, \tag{3}$$

где P — давление, $k = 1, 2, 3$. В феноменологической теории сплошной среды ρ, U и ϵ вначале рассматриваются, как средние величины в некотором конечном объеме θ , таком, что в нем находится много микрочастиц. Затем постулируется [2], что при стягивании конечного объема в точку средние величины ρ, U и ϵ имеют конечные пределы, которые и являются характеристиками сплошной среды в точке. При этом, как правило, не уточняется физическое содержание понятия "много частиц", что приводит к затруднениям при установлении количественного соответствия между параметрами сплошной среды (макроуровень) и параметрами дискретной среды (микроуровень).

Рассмотрим теперь дискретную среду микрочастиц. Пусть в некотором произвольном конечном объеме θ находится n микрочастиц. Каждая частица имеет номер ν , массу m_ν , скорость U_ν и внутреннюю энергию q_ν . В некоторый фиксированный момент времени t^* масса M , количество движения K и энергия Q_0 всех n частиц определяются суммированием

$$M = \sum_{\nu=1}^n m_\nu, \quad K = \sum_{\nu=1}^n m_\nu U_\nu, \quad Q_0 = \sum_{\nu=1}^n m_\nu (q_\nu + 0.5 U_\nu^2).$$

Таким образом, в любой момент времени t законы сохранения M, K и Q_0 при переходе от микро- к макроуровню и обратно имеют вид

$$\int_0^\theta \rho d\theta = \sum_{\nu=1}^n m_\nu, \quad \int_0^\theta \rho U d\theta = \sum_{\nu=1}^n m_\nu U_\nu, \quad \int_0^\theta \rho \epsilon d\theta = \sum_{\nu=1}^n m_\nu (q_\nu + 0.5 U_\nu^2). \tag{4}$$

При таком подходе не нарушается принцип неопределенности, так как не требуется указывать положение каждой частицы. Для решения разных задач предпочтительными являются либо микро-, либо макромоделли. Для описания поведения плотных газов и жидкостей в динамических процессах успешно применяется модель сплошной среды с соответствующим уравнением состояния.

Во второй половине XX века появилось много моделей, сочетающих континуальное описание вещества с дискретным, когда траектория частицы с номером v определяется уравнением Ньютона (Newton):

$$m_v \frac{dU_v}{dt} = F_v.$$

Частица может быть "большой" и содержать настолько много микрочастиц, что ее свойства определялись как свойства сплошной среды на мезоуровне. Силы, действующие на мезочастицу, могут определяться по-разному.

В гидродинамике, например, широко распространилась модель частиц, берущая начало с метода "частицы в ячейках", который был создан в 1955 г. Ф. Харлоу (F. Harlow) с сотрудниками [3, 4] для численного решения уравнений (1)–(3). В методе частиц величины ∇P и ∇U определяются на макроуровне сплошной среды, параметры которой находятся из уравнений типа (4) и уравнения состояния. Затем эти ∇P и ∇U действуют на мезочастицы, которые с течением времени сохраняют "свою" массу и перемещаются по "своим" траекториям. Особенно эффективными методы частиц оказались при решении задач физики плазмы [5, 6]. Некоторые из методов частиц имеют недостатки. Одним из существенных недостатков является отсутствие инвариантности к преобразованию Галилея (G. Galilei).

Для повышения эффективности математического моделирования свойств веществ был создан метод молекулярной динамики [7, 8]. В этом методе законы взаимодействия микрочастиц друг с другом переносятся на мезочастицы — большие молекулы. Метод молекулярной динамики оказался весьма эффективным при построении уравнений состояния вещества, успешно дополняя методы статистической физики, физической и квантовой механики и термодинамики. В кинетической теории газов, когда пробег микрочастиц от взаимодействия до взаимодействия намного больше размеров частицы, эффективными оказываются дискретные модели, основанные на вероятностном описании поведения ансамбля частиц с помощью уравнения Больцмана (Boltzmann).

Необходимость повышения точности математического моделирования поведения твердых тел при пластической деформации привела к появлению моделей, в которых модель сплошной среды применяется на нескольких мезоуровнях. Такой подход к моделированию поведения твердого тела называют мезомеханикой. В работе [9] рассмотрены модели пластической деформации, в которых носителями пластической деформации являются структурные элементы, ответственные и за сдвиги, и за взаимные повороты. Их размеры, интенсивность и взаимодействие определяются микро-, мезо- и макровихрями. Эта модель механики заменяется (аппроксимируется) некоторой математической моделью, которую можно применять для проведения расчетов на ЭВМ. В [10] излагаются результаты расчетов поведения твердых тел в области пластических деформаций, полученные с помощью двухуровневой модели мезомеханики.

В литературе [3–8] описано много вариантов метода частиц и метода молекулярной динамики. Второе дыхание и те, и другие методы получили в последнее десятилетие, когда начали бурно внедряться нанотехнологии. Подробный обзор многоуровневых моделей, лежащих между моделями, описывающими вещества на микро- и макроуровнях, дан в [11].

История моделей многокомпонентных сред. 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 (МКС). Сплошную среду в произвольном объеме называют [12] многокомпонентной, 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. Поскольку разные компоненты МКС различаются теплоемкостями, скоростями звука, сжимаемостями и другими физическими характеристиками, 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 (H. Darcy), 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. Черный (1951),

Х. А. Рахматулин, С. С. Кутателадзе (1956), В. В. Струминский, Р. И. Нигматулин (1961), А. Н. Крайко (1965), В. П. Мясников (1966), В. Е. Накоряков (1971), Н. Н. Яненко, В. М. Фомин, Р. И. Солоухин (1976). За рубежом это Т. Каулинг (T. Cowling), Р. А. Тупин (R. Tourpin), С. Трусделл (S. Truesdell), С. Чепмен (S. Chapman) (1956), А. Грин (A. Green), П. Келли (P. Cayley), Ж. Клигель (G. Cliegel), П. Нахди (P. Naghdi) (1961), Ж. Бэтчелор (G. Batchelor), Ж. Мюллер (G. Müller) (1966), Л. Вингарден (L. Wijngaarden) (1971). 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 [13]. 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) при решении многих задач 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 (H. Darcy), Баклея–Левретта (Buckley–Leverett) и др. [12]), 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 [12–18]. В классе этих моделей есть более простые и более сложные. Сложность модели зависит от сделанных упрощений. Из-за сложности 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 интенсивно развивается. 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 проблемы согласования законов сохранения компонентов с законами сохранения смеси [17]. 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.

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, U_i — скорость, S_i — энтропию и др. Термодинамические характеристики i -го компонента связаны уравнением состояния.

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

$$M = \sum_{i=1}^N M_i, \quad \theta = \sum_{i=1}^N \theta_i. \quad (5)$$

Отношения

$$\eta_i = \frac{M_i}{M}, \quad \alpha_i = \frac{\theta_i}{\theta} \quad (6)$$

называют [12–18] массовой и объемной концентрациями i -го компонента. По определению плотность — это масса вещества в единичном объеме. Следовательно:

$$\rho_i = \frac{M_i}{\theta_i}, \quad \rho = \frac{M}{\theta}, \quad (7)$$

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

$$\alpha_i \rho_i = \frac{M_i}{\theta} \quad (8)$$

является виртуальной величиной и называется парциальной плотностью i -го компонента. Из (5)–(8) видно, что $\alpha_i \rho_i$ и ρ связаны уравнением

$$\alpha_i \rho_i = \eta_i \rho. \quad (9)$$

Для удельного объема $V = 1/\rho$ соотношение (9) принимает вид

$$\alpha_i V = \eta_i V_i.$$

Из (5), (7) и (8) следует, что плотность смеси равна сумме парциальных плотностей компонентов

$$\rho = \sum_{i=1}^N \alpha_i \rho_i. \quad (10)$$

Каждый компонент смеси имеет количество движения $U_i M_i$. Из закона сохранения количества движения при фиксированном времени t следует

$$UM = \sum_{i=1}^N U_i M_i.$$

Заменив M_i с помощью (6) на $\eta_i M$ и сократив на M , получим, что скорость смеси U равна сумме парциальных скоростей $\eta_i U_i$ компонентов

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

Из (9) и (11) следует, что удельное количество движения смеси ρU равно сумме удельных количеств движения компонентов

$$\rho U = \sum_{i=1}^N \alpha_i \rho_i U_i. \quad (12)$$

Удельная полная энергия смеси ϵ состоит из удельной внутренней энергии E и удельной кинетической энергии $0.5U^2$. Аналогичная связь имеет место и для i -го компонента

$$\epsilon = E + 0.5U^2, \quad \epsilon_i = E_i + 0.5U_i^2. \quad (13)$$

Из закона сохранения энергии при фиксированном времени следует

$$\epsilon M = \sum_{i=1}^N \epsilon_i M_i.$$

После деления на M и использования (6) получим, что удельная полная энергия смеси равна сумме парциальных удельных полных энергий компонентов

$$\epsilon = \sum_{i=1}^N \eta_i \epsilon_i. \quad (14)$$

Из (13) и (14) следует

$$E = \sum_{i=1}^N \eta_i (E_i + 0.5U_i^2 - 0.5U^2). \quad (15)$$

В процессе релаксации скоростей $U_i \neq U$ и, таким образом, удельная внутренняя энергия смеси не равна сумме парциальных внутренних энергий компонентов. Легко проверить, что выражение (15) для E не инвариантно к преобразованию Галилея (G. Galilei). Преобразуем выражение (15) так, чтобы оно не зависело от выбора системы координат, движущейся с постоянной скоростью. Умножим (11) на U и запишем полученное уравнение в виде

$$\sum_{i=1}^N \eta_i U^2 = \sum_{i=1}^N \eta_i (2U_i U - U^2). \quad (16)$$

Подставив (16) в (15), получим выражение для E , удовлетворяющее преобразованию Галилея (G. Galilei):

$$E = \sum_{i=1}^N \eta_i (E_i + H_i), \quad (17)$$

где

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

Величину $H = \sum_{i=1}^N \eta_i H_i$ назовем неравновесной кинетической энергией смеси. В процессе релаксации скоростей

при $\mathbf{U} - \mathbf{U}_i \rightarrow 0$ она переходит во внутреннюю энергию, которая таким образом возрастает.

Физические величины $P_i, \rho_i, E_i, T_i, \mathbf{U}_i$ и другие являются величинами макроуровня i -го компонента, а парциальные величины $\alpha_i \rho_i, \alpha_i P_i, \eta_i \mathbf{U}_i, \eta_i E_i, \eta_i \epsilon_i$ и другие описывают его поведение, как сплошной среды. Однако каждый компонент является структурным элементом смеси. Таким образом, указанные величины по отношению к смеси являются величинами промежуточного уровня — мезоуровня. Величины макроуровня, характеризующие поведение смеси, получаются из величин мезоуровня с помощью уравнений (10), (11), (14), (17).

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

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

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 [12, 14–16, 18]. В случае, если $\mathbf{U}_i \neq \mathbf{U}_j$, обмен импульсом определялся чаще всего вектором

$$\bar{\mathbf{R}}_{ij} = a_{ij} (\mathbf{U}_j - \mathbf{U}_i) / \tau_{ij}^U. \quad (18)$$

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

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

вследствие чего вектор \mathbf{R} удовлетворяет условию

$$\mathbf{R}_{ij} = -\mathbf{R}_{ji}. \quad (19)$$

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 :

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

В силу условий (19) вектор \mathbf{R} , действующий на смесь со стороны всех компонентов, оказывается равным нулю:

$$\mathbf{R} = \sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^N \alpha_i \alpha_j \mathbf{R}_{ij} = 0. \quad (20)$$

Аналогичные рассуждения относятся и к скалярной функции Φ_{ij} , описывающей обмен энергией i -го и j -го компонентов. Согласно [17], запишем эту функцию в виде

$$\Phi_{ji} = \frac{b_{ji}}{\tau_{ji}^P} (P_j - P_i) + \frac{c_{ji}}{\tau_{ji}^T} (\alpha_i \rho_i C_{vi} + \alpha_j \rho_j C_{vj}) (T_j - T_i), \quad (21)$$

где $b_{ij} = b_{ji}$, $c_{ij} = c_{ji}$, $\tau_{ij}^P = \tau_{ji}^P$, $\tau_{ij}^T = \tau_{ji}^T$, $\Phi_{ji} = -\Phi_{ij}$, C_V — теплоемкость при постоянном объеме. Функции b_{ij} , c_{ij} безразмерны. Как и a_{ij} , они зависят от степени гетерогенности и от свойств i -го и j -го компонентов. 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:

$$\Phi = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \alpha_i \alpha_j \Phi_{ij} = 0. \quad (22)$$

Уравнения (20), (22) — это принципиальная особенность модели парных взаимодействий.

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

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_i \rho_i) + \nabla (\alpha_i \rho_i \mathbf{U}_i) = 0, \quad (23)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_i \rho_i \mathbf{U}_i) + \nabla \alpha_i P_i + \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_k} (\alpha_i \rho_i \mathbf{U}_i U_{ik} + \alpha_i \mathbf{F}_{ik}) - \alpha_i \mathbf{R}_i = 0, \quad (24)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_i \rho_i \epsilon_i) + \nabla (\alpha_i \mathbf{U}_i (P_i + \rho_i \epsilon_i)) + \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_k} (\alpha_i \mathbf{F}_{ik} \mathbf{U}_i) + \nabla \alpha_i \mathbf{Q}_i - \alpha_i \Phi_i = 0. \quad (25)$$

К системе уравнений (23)–(25) нужно добавить уравнение состояния в виде

$$P_i = P_i(\rho_i, E_i), \quad T_i = T_i(\rho_i, E_i) \quad (26)$$

и выражение ϵ_i через E_i и $0.5\mathbf{U}_i^2$

$$\epsilon_i = E_i + 0.5\mathbf{U}_i^2. \quad (27)$$

Новыми по сравнению с [12], [14–16] в этих уравнениях являются вектор \mathbf{F}_{ik} , образованный элементами k -й строки тензора \mathbf{F}_i , и вектор \mathbf{Q}_i .

Уравнения (23)–(27) замыкаются уравнением для объемной концентрации α_i .

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

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \rho \mathbf{U} = 0, \quad (28)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{U}) + \mathbf{U} \nabla (\rho \mathbf{U}) + \rho (\mathbf{U} \nabla) \mathbf{U} + \nabla P + \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_k} \mathbf{F}_k = 0, \quad (29)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \epsilon) + \nabla \mathbf{U} (P + \rho \epsilon) + \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_k} (\mathbf{U} \mathbf{F}_k) + \nabla \mathbf{Q} = 0. \quad (30)$$

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

Необходимые условия согласованности законов сохранения. При отсутствии химических реакций законы сохранения массы i -го компонента и смеси имеют вид (23) и (28). Поскольку справедливы уравнения (10) и (12), просуммировав (23), получим (28). Таким образом, 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

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

С помощью уравнений (12) и уравнения

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

преобразуем (31) к виду

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{U}) + \mathbf{U} \nabla (\rho \mathbf{U}) + \rho (\mathbf{U} \nabla) \mathbf{U} + \nabla P + \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_k} \mathbf{F}_k + \omega_1 = 0, \quad (32)$$

где

$$\omega_1 = \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\sum_{i=1}^N (\alpha_i \rho_i \mathbf{U}_i U_{ik} + \alpha_i \mathbf{F}_{ik}) - \mathbf{F}_k - \rho \mathbf{U} U_k \right) = 0. \quad (33)$$

Из сравнения (32) и (29) следует, что необходимое условие получения закона сохранения количества движения смеси путем суммирования по всем компонентам уравнений (24) имеет вид $\omega_1 = 0$. Сила $\alpha_i \mathbf{F}_{ik}$ действует на i -й компонент со стороны смеси, как совокупности компонентов. Сила \mathbf{F}_k — это равнодействующая сил, с которыми каждый компонент действует на смесь. Согласно третьему закону Ньютона (I. Newton):

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

Подставив (34) в (33) и приравняв ω_1 нулю, получим уравнение

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

С помощью (12) представим $\rho \mathbf{U} U_k$ в виде суммы по компонентам

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

Из (35) и (36) следует уравнение

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

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

$$\mathbf{F}_{ik} = -0.5 \rho_i (\mathbf{U} - \mathbf{U}_i) (U_k - U_{ik}). \quad (37)$$

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

Рассмотрим далее закон сохранения энергии. Просуммируем (25) по всем компонентам, добавим и отнимем величину

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

и полученное уравнение преобразуем к виду

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

где

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

Из сравнения (38) с законом сохранения энергии смеси (30) видно, что необходимое условие получения закона сохранения энергии смеси путем суммирования законов сохранения энергии компонентов имеет вид $\omega_2 = 0$.

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

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

Из (13), (37), (39), (40) и условия $\omega_2 = 0$ следует уравнение

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

Приравняв нулю каждое слагаемое, получим выражение для потока энергии

$$Q_i = 0.5 (U - U_i) (P_i + \rho_i E_i). \quad (41)$$

Рассматриваемая модель содержит новый тип взаимодействия компонентов — кластерное взаимодействие или взаимодействие каждого компонента со смесью в целом. Этот вид взаимодействия описывается универсальными силами F_{ik} (37) и потоками энергии 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 (G. Galilei).

Замыкание системы уравнений. Система уравнений i -го компонента содержит $11N$ независимых величин

$$P_i, \rho_i, E_i, \epsilon_i, T_i, U_i, \alpha_i, R_i, \Phi_i, F_{ik}, Q_i$$

и $10N$ независимых уравнений:

- а) $3N$ законов сохранения (28)–(30);
- б) N уравнений, связывающих удельные значения полной, внутренней и кинетической энергий (27);
- в) $2N$ уравнений состояния (26);
- г) $4N$ уравнений для функций взаимодействия (18), (21), (37), (41).

Чтобы система уравнений стала замкнутой, пужно к перечисленным выше уравнениям добавить N уравнений для определения α_i . Эти уравнения не должны зависеть от уже имеющихся уравнений.

В качестве первого шага продифференцируем уравнение

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

вдоль траектории смеси

$$\sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial \alpha_i}{\partial t} + U \nabla \alpha_i \right) = 0. \quad (42)$$

Полученное уравнение (42) инвариантно к преобразованию Галилея (G. Galilei). В нем каждое слагаемое не равно нулю, так как α_i изменяются со временем вдоль траектории смеси. Добавим к (42) функцию Ω_i , удовлетворяющую следующим условиям:

- 1) функция Ω_i должна быть инвариантна к преобразованию Галилея (G. Galilei);
- 2) сумма Ω_i должна быть равна нулю:

$$\sum_{i=1}^N \Omega_i = 0. \quad (43)$$

После сложения (42) и (43) получим уравнение

$$\sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial \alpha_i}{\partial t} + \mathbf{U} \nabla \alpha_i + \Omega_i \right) = 0. \quad (44)$$

Следующее условие, которому должна удовлетворять функция Ω_i : она должна обращать в ноль каждое слагаемое в сумме (44). Таким образом, для определения α_i получается уравнение

$$\frac{\partial \alpha_i}{\partial t} + \mathbf{U} \nabla \alpha_i + \Omega_i = 0. \quad (45)$$

Объемная концентрация α_i зависит от взаимодействия компонентов. Две функции \mathbf{R}_i и Φ_i , описывающие парные взаимодействия компонентов, удовлетворяют перечисленным выше условиям. Поскольку уравнение (45) скалярное, естественно взять функцию Ω_i в виде, близком к функции Φ_i . Эти функции имеют разные размерности, поскольку являются слагаемыми в разных уравнениях. Чтобы определить различия между ними, рассмотрим простейшую систему из двух плоских слоев разных веществ, находящихся между двумя жесткими стенками, ортогональными оси Ox . Каждый слой характеризуется набором физических параметров $P_{л}, \rho_{л}, E_{л}, c_{л}$ и $P_{п}, \rho_{п}, E_{п}, c_{п}$ и имеет толщину $\Delta x_{л}, \Delta x_{п}$. Скорости равны нулю, а давления при $t = 0$ разные. Поэтому при $t > 0$ контактная граница начнет двигаться со скоростью

$$U_{к.г} \approx - \frac{2(P_{п} - P_{л})}{h_{п} - h_{л}} t, \quad (46)$$

где $h_{п} = \rho_{п} \Delta x_{п}, h_{л} = \rho_{л} \Delta x_{л}$. По условиям задачи $\Delta x_{л}$ и $\Delta x_{п}$ изменяются так, что $\Delta x_{л} + \Delta x_{п} = \text{const}$. Введем средние объемные концентрации правого и левого вещества:

$$\alpha_{п} = \frac{\Delta x_{л}}{\Delta x_{л} + \Delta x_{п}}, \quad \alpha_{л} = \frac{\Delta x_{п}}{\Delta x_{л} + \Delta x_{п}}. \quad (47)$$

Из (46), (47) следует уравнение

$$\frac{\partial \alpha_{л}}{\partial t} \approx - \frac{2(P_{п} - P_{л}) t}{(\Delta x_{л} + \Delta x_{п})(h_{л} + h_{п})}. \quad (48)$$

В акустическом приближении выразим Δx и h через скорости звука и время релаксации τ

$$\Delta x_{л} + \Delta x_{п} \approx (c_{л} + c_{п}) \tau, \quad h_{л} + h_{п} \approx (\rho_{л} c_{л} + \rho_{п} c_{п}) \tau,$$

а время t будем считать пропорциональным времени релаксации $t \approx b\tau$. При этих гипотезах уравнение (48) примет вид

$$\frac{\partial \alpha_{л}}{\partial t} \approx - \frac{(P_{п} - P_{л}) b}{(c_{п} + c_{л})(\rho_{п} c_{п} + \rho_{л} c_{л}) \tau}.$$

С учетом сказанного выше умножим функцию Φ_{ij} (23) на функцию

$$f_{ij} = \frac{1}{(c_i + c_j)(\rho_i c_i + \rho_j c_j)},$$

в результате чего Ω_i примет вид

$$\Omega_i = \alpha_i \sum_{j=1}^N \alpha_j f_{ij} \Phi_{ij}.$$

Молекулярно-кинетическое обоснование силы кластерного взаимодействия. Выражения для \mathbf{F}_{ik} и \mathbf{Q}_i получены на макроуровне как необходимые условия согласования законов сохранения компонентов и смеси. Получим выражение сил \mathbf{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 микроуровня молекул на макроуровень компонента сделаем, следуя учебникам физики [19–21], несколько предположений:

- 1) молекулы имеют массу и не имеют объема;
- 2) молекулы движутся 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_{vi} и скорость U_{vi} . Масса и значения плотности ρ_i и скорости U_i газа определяются уравнениями

$$M_i = \sum_{v=1}^{n_i} m_{vi}, \quad \rho_i = \frac{M_i}{\theta_i}, \quad U_i = \sum_{v=1}^{n_i} \eta_{vi} U_{vi}, \quad (49)$$

где η_{vi} — массовая концентрация v -й молекулы в газе i . Скорость U_i определяет кинетическую энергию i -го компонента, которая меньше, чем полная кинетическая энергия всех n_i молекул. Их разность, деленная на M_i , определяет удельную внутреннюю энергию

$$E_i = \sum_{v=1}^{n_i} 0.5 \eta_{vi} (U_{vi} - U_i)^2. \quad (50)$$

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 Ox, Oy, Oz :

$$\Phi_{ix} = -\rho_i \sum_{v=1}^{n_i} \eta_{vi} (U_{vix} - U_{ix})^2 \mathbf{i},$$

$$\Phi_{iy} = -\rho_i \sum_{v=1}^{n_i} \eta_{vi} (U_{viy} - U_{iy})^2 \mathbf{j},$$

$$\Phi_{iz} = -\rho_i \sum_{v=1}^{n_i} \eta_{vi} (U_{viz} - U_{iz})^2 \mathbf{k}.$$

Векторы $\Phi_{ix}, \Phi_{iy}, \Phi_{iz}$ образованы диагональными элементами тензора Φ . Согласно правилам механики, давление равно сумме диагональных членов с обратным знаком, деленной на три:

$$P_i = \frac{1}{3} \rho_i \sum_{v=1}^{n_i} \eta_{vi} (U_{vi} - U_i)^2. \quad (51)$$

Исключив сумму в (50) и (51), 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 , то 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 в соответствии с описанной выше процедурой совершается переход с микроуровня 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 U_i и энергия E_i имеют вид (49), (50). Из законов сохранения

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

и определений

$$K = UM, \quad K_i = U_i M_i, \quad \eta_i = M_i/M$$

следует выражение для скорости смеси (11). С этой скоростью движется объем θ и его грани. Поскольку $U_i \neq U$, 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 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 U_i удовлетворяют неравенствам

$$(U_{ix}^f - U_x)(U_{ix} - U_x) < 0.$$

$$(U_{iy}^f - U_y)(U_{iy} - U_y) > 0, \quad (U_{iz}^f - U_z)(U_{iz} - U_z) > 0.$$

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

$$U_{ix}^f - U_x = -\gamma(U_{ix} - U_x), \tag{52}$$

при касании

$$U_{iy}^f - U_y = \beta(U_{iy} - U_y), \quad U_{iz}^f - U_z = \beta(U_{iz} - U_z). \tag{53}$$

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 F_{ixx} , действующую на i -й компонент со стороны единичной площадки S_x в направлении от Ox , найдем из условия, что ее импульс за время

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

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 выражение силы F_{ixx} значение U_{ix}^f из (52), значение M_i из (8) и разделив на $\theta^{2/3}$ — площадь грани S_x , получим выражение силы F_{ixx} в виде

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

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

$$M_i (U_{iy}^f - U_{iy}) = F_{ixy} \Delta t_{ixy}. \tag{54}$$

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

$$\Delta t_{ixy} = R(\beta) \Delta t_{ixx}. \tag{55}$$

Из (52)–(55) следует 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 F_{ix} с составляющими $F_{ixx}, F_{ixy}, F_{ixz}$ имеет вид

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

Аналогично получаются и векторы \mathbf{F}_{iy} , \mathbf{F}_{iz} . Параметры модели α , β и R уточнить с помощью теории не удается. Однако при конкретном выборе значений этих параметров

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

выражение \mathbf{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 U и i -го компонента U_i приводят к одному и тому же результату.

Условия на сильном разрыве. Во многих ранее опубликованных работах [22–28] ударные адиабаты смесей определялись экспериментально путем измерения скорости ударной волны D в смеси и восстановления массовой скорости \mathbf{U} методом отражения по скоростям в экранах или ударниках. Как правило, ударная адиабата смеси определялась в предположении, что смесь является однородным веществом. Такой подход может быть оправдан для компонентов с близкими свойствами и в узком диапазоне объемных концентраций. В случае, когда плотности компонентов сильно различаются или объемная концентрация одного из них близка к нулю или единице, справедливость такого подхода вызывает сомнения. Одна из убедительных попыток поколебать классический подход к определению ударной адиабаты смеси изложена в [28]. Показано, что в некоторых смесях с объемной концентрацией тяжелого компонента $\alpha = 0.2$ давление на ударной волне изменяется вследствие релаксационных процессов задолго до того, как ее догонит волна разгрузки от тыльной поверхности ударника.

Многочисленные экспериментальные и теоретические исследования по изучению распространения ударных волн в многокомпонентных средах [22–30] позволяют сделать вывод, что ударная волна в МКС не расщепляется на несколько сильных разрывов. Основываясь на этих наблюдениях, введем в рассмотрение скорость распространения сильного разрыва в смеси в лагранжевых координатах $W = \frac{dm}{dt}$. Сильный разрыв — это поверхность, на которой все характеристики компонентов и смеси изменяются скачком. Независимо от состояния компонентов перед разрывом их состояние за разрывом всегда неравновесно: $U_i \neq U_j$, $P_i \neq P_j$, $T_i \neq T_j$. На поверхности сильного разрыва (за ним) начинаются релаксационные процессы установления равновесия: $U_i - U_j \rightarrow 0$, $P_i - P_j \rightarrow 0$, $T_i - T_j \rightarrow 0$. Эти процессы протекают в области конечного размера Δx , которая трактуется как ширина фронта ударной волны. Таким образом, условия на ударной волне в смеси — это законы сохранения, записанные для состояний вещества перед сильным разрывом и в конце области релаксации. Они не могут быть получены суммированием уравнений на сильных разрывах компонентов смеси. Изложенная выше структура величин в ударной волне качественно согласуется с экспериментальными данными, полученными в [28].

Рассмотрим законы сохранения i -го компонента на сильном разрыве. Каждый компонент "соберем" в объем θ_i , в котором нет других компонентов. На поверхности сильного разрыва касательная составляющая скорости непрерывна. Поэтому рассмотрим переход через разрыв в одномерной постановке. Направим ось Ox по нормали к поверхности разрыва. В одномерном плоском случае уравнения i -го компонента (23)–(25) и (45) после перехода от эйлеровой координаты x к лагранжевой координате m_i запишутся в виде

$$\frac{d_i}{dt} \left(\frac{1}{\rho_i} \right) - \frac{\partial U_i}{\partial m_i} = 0, \quad (56)$$

$$\frac{d_i U_i}{dt} + \frac{\partial}{\partial m_i} (P_i + F_i) - \frac{R_i}{\rho_i} = 0, \quad (57)$$

$$\frac{d_i \varepsilon_i}{dt} + \frac{\partial}{\partial m_i} (u_i (P_i + F_i) + Q_i) - \frac{\Phi_i + A_i}{\rho_i} = 0, \quad (58)$$

$$\frac{d_i \alpha_i}{dt} + \alpha_i \rho_i (U - U_i) \frac{\partial \alpha_i}{\partial m_i} + \Omega_i = 0. \quad (59)$$

Рассмотрение условий на сильном разрыве начнем с уравнения (59). Умножим его на $dm_i dt$ и проинтегрируем по прямоугольнику $0 \leq m_i \leq \Delta m_i$, $0 \leq t \leq \Delta t_i$, где Δm_i и Δt_i связаны уравнением

$$\Delta m_i = W_i \Delta t_i .$$

Рассмотрим три интеграла по отдельности. Первый интеграл

$$J_1 = \int_0^{\Delta m_i} \int_0^{\Delta t_i} \frac{d_i \alpha_i}{dt} dt dm_i$$

после интегрирования по t и применения теоремы о среднем значении имеет вид

$$J_1 = (\alpha_{i+} - \alpha_{i-}) \Delta m_i .$$

Здесь и везде далее величины с индексом "+" характеризуют состояние за сильным разрывом, величины с индексом "-" — перед сильным разрывом. Во втором интеграле

$$J_2 = \int_0^{\Delta t_i} \int_0^{\Delta m_i} \alpha_i \rho_i (U - U_i) \frac{d_i \alpha_i}{dm_i} dm_i dt$$

применим обобщенную теорему о среднем значении, после чего он примет вид

$$J_2 = \left[\frac{1}{2} \Delta t_i^2 \left((\alpha_{i+} \rho_{i+} (U_+ - U_{i+}) - \alpha_{i-} \rho_{i-} (U_- - U_{i-})) W_i + \alpha_{i-} \rho_{i-} (U_- - U_{i-}) \Delta m_i \Delta t_i \right) \right] (\alpha_{i-} - \alpha_{i+}) .$$

Третий интеграл с помощью теоремы о среднем значении представим в виде

$$J_3 = \int_0^{\Delta t_i} \int_0^{\Delta m_i} \Omega_i dt dm_i = \Omega_i^* \Delta t_i \Delta m_i .$$

где * означает, что значение Ω_i^* лежит внутри рассматриваемого прямоугольника. Разделив сумму трех интегралов на Δt_i и перейдя к пределу при $\Delta t_i \rightarrow 0$, получим при $W_i \neq 0$ условие на сильном разрыве

$$\alpha_{i+} - \alpha_{i-} = 0 . \tag{60}$$

Следуя изложенной выше процедуре перехода от дифференциальных уравнений (56)–(58) к уравнениям на разрыве, получим три закона сохранения i -го компонента на поверхности сильного разрыва в виде

$$\frac{1}{\rho_{i+}} W_i + U_{i+} = \frac{1}{\rho_{i-}} W_i + U_{i-} . \tag{61}$$

$$U_{i+} W_i - P_{i+} - F_{i+} = U_{i-} W_i - P_{i-} - F_{i-} , \tag{62}$$

$$\epsilon_{i+} W_i - U_{i+} (P_{i+} + F_{i+}) - Q_{i+} = \epsilon_{i-} W_i - U_{i-} (P_{i-} + F_{i-}) - Q_{i-} . \tag{63}$$

Величины с индексом "-" в уравнениях (60)–(63) предполагаются известными. Они характеризуют состояние перед сильным разрывом. Величины с индексом "+" нужно определить. Для замыкания системы уравнений (60)–(63) к ним добавляется ряд уравнений. Одно из них — уравнение состояния

$$P_{i+} = P_i (\rho_{i+}, E_{i+}) . \tag{64}$$

Входящая в него удельная внутренняя энергия E_{i+} выражается через ϵ_{i+} и U_{i+} с помощью уравнения

$$E_{i+} = \epsilon_{i+} - 0.5 U_{i+}^2 . \tag{65}$$

Еще два уравнения — это выражения для функций кластерного взаимодействия F_{i+} и Q_{i+} :

$$F_{i+} = -0.5 \rho_{i+} (U_{i+} - U_+)^2 , \quad Q_{i+} = 0.5 (U_+ - U_{i+}) (P_{i+} + \rho_{i+} E_{i+}) . \tag{66}$$

Уравнения (66) содержат массовую скорость смеси U_+ , которая выражается через скорости компонентов:

$$U_+ = \sum_{i=1}^N \eta_i U_{i+}, \quad (67)$$

где

$$\eta_{i+} = \alpha_{i+} \rho_{i+} / \rho_+, \quad \rho_+ = \sum_{i=1}^N \alpha_{i+} \rho_{i+}. \quad (68)$$

Уравнения (60)–(68) образуют систему $9N + 2$ уравнений для определения $10N + 2$ величин $W_i, P_{i+}, \rho_{i+}, E_i, U_{i+}, \alpha_{i+}, \epsilon_{i+}, F_{i+}, Q_{i+}, \eta_{i+}, U_{i+}, \rho_{i+}$. Уравнений (60)–(68) недостаточно, чтобы построить ударную адиабату смеси. Дело в том, что значения W_i не связаны друг с другом. Тем более они не связаны со скоростью распространения сильного разрыва W в смеси, которая в уравнениях отсутствует.

Скорость распространения скачка и скорость звука смеси. Рассмотрим в одномерной постановке покоящийся объем Δx , в котором находится N компонентов с известными физическими характеристиками. Ограничимся простейшей моделью, когда все компоненты являются плоскими слоями, имеющими массу Δm_i , которые удовлетворяют законам сохранения:

$$\Delta m = \sum_{i=1}^N \Delta m_i. \quad (69)$$

Время прохождения ударной волной слоя с массой Δm_i равно

$$\Delta t_i = \frac{\Delta m_i}{W_i}.$$

На последовательное прохождение ударной волной всех N слоев ей потребуется время

$$\Delta t = \sum_{i=1}^N \frac{\Delta m_i}{W_i}. \quad (70)$$

Определим среднюю скорость ударной волны в рассматриваемой слоистой смеси уравнением

$$W = \frac{\Delta m}{\Delta t}.$$

Подставив сюда выражения для Δt (70), получим связь W с W_i в виде

$$\frac{1}{W} = \sum_{i=1}^N \frac{\eta_i}{W_i}, \quad (71)$$

где η_i — массовая концентрация i -го компонента ($\eta_i = \Delta m_i / \Delta m$). По определению

$$W = \rho (D - U), \quad W_i = \rho_i (D_i - U_i).$$

Подставив W, W_i и η_i , выраженное из (9), в (71), получим уравнение

$$\frac{1}{D - U} = \sum_{i=1}^N \frac{\alpha_i}{D_i - U_i}. \quad (72)$$

Вопрос о нахождении скорости звука смеси по скоростям звука и концентрациям компонентов до последнего времени разными авторами решался в предположении, что смесь имеет уравнение состояния и скорость звука может быть определена по классической формуле

$$c^2 = \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_S,$$

где ρ, P, S — плотность, давление и энтропия смеси. При этом, как правило, неявно делались предположения, что $P_i = P, \alpha_i$ и η_i не зависят от P и $S_i = \text{const}$ одновременно с S [25, 29–31].

Откажемся от всех таких неявных предположений, поскольку, как отмечалось выше, смесь не имеет УРС. Будем исходить из уравнения (72). Акустические возмущения (бесконечно слабые ударные волны) распространяются вдоль характеристик первого и второго семейства, определяемых уравнениями

$$\frac{dx}{dt} = D = U \pm C, \quad \frac{dx}{dt} = D_i = U_i \pm C_i. \quad (73)$$

Из (72) и (73) следует зависимость скорости звука смеси от скоростей звука и объемных концентраций компонентов

$$\frac{1}{C} = \sum_{i=1}^N \frac{\alpha_i}{C_i}. \quad (74)$$

Легко убедиться, что формула (74) намного точнее, чем другие зависимости, описывает экспериментальные данные по многим многокомпонентным составам.

Скорость распространения скачка в компоненте смеси. Рассмотрим условие на поверхности сильного разрыва в i -м компоненте при отсутствии кластерного взаимодействия, являющееся следствием уравнений (61)–(63), (65):

$$H_{i+} - H_{i-} = 0.5 W_i^2 (V_{i-}^2 - V_{i+}^2),$$

где $V_i = 1/\rho_i$, $H_i = E_i + P_i V_i$ — энтальпия. Добавим уравнение, определяющее изменение энтальпии вдоль луча, касательного к изэнтропе в точке P_{i-} , V_{i-}

$$H_{i+}^S - H_{i-} = 0.5 (\rho_{i-} C_{i-})^2 (V_{i-}^2 - V_{i+}^2).$$

Отношение

$$\frac{H_{i+} - H_{i-}}{H_{i+}^S - H_{i-}} = \frac{W_i^2}{(\rho_{i-} C_{i-})^2}$$

приближенно характеризует диссипацию энергии на сильном разрыве в i -м компоненте. Аналогично получается уравнение

$$\frac{H_+ - H_-}{H_+^S - H_-} = \frac{W^2}{(\rho_- C_-)^2},$$

приближенно характеризующее диссипацию энергии на сильном разрыве в смеси. Потребуем, чтобы разность между диссипацией энергии во всех компонентах и диссипацией энергии в смеси была минимальна. Для этого рассмотрим функцию

$$F = \sum_{i=1}^N \eta_i \left(\frac{W_i^2}{(\rho_{i-} C_{i-})^2} - \frac{W^2}{(\rho_- C_-)^2} \right)^2$$

и приравняем нулю все ее частные производные по W_i . В результате получим N уравнений, выражающих W_i через W и через величины ρ_{i-} , C_{i-} , ρ_- , C_- , характеризующие состояние i -го компонента и смеси перед разрывом:

$$W_i = W \left(\frac{\rho_{i-} C_{i-}}{\rho_- C_-} \right). \quad (75)$$

Уравнение (75) добавляет к системе уравнений (60)–(68) еще N уравнений и одну величину W . В результате полная система уравнений (60)–(68), (75) содержит $10N + 2$ уравнений и $10N + 3$ величин и является типичной ударной адиабатой, определяющей состояние за поверхностью сильного разрыва в зависимости от одного параметра W .

Частные модели. В диффузионных моделях, как правило, рассматриваются сплошная среда и примесь, имеющая массовую концентрацию η . Примесь и несущая среда двигаются с одинаковой скоростью U . В [32] приводятся уравнения неразрывности и концентрации в типичной диффузионной модели

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \rho U = 0, \quad \rho \frac{\partial \eta}{\partial t} + \nabla J = 0, \quad (76)$$

где J — поток примеси

$$J = -\rho D_0 \nabla \eta.$$

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)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \rho \mathbf{U} = 0, \quad \frac{\partial \alpha_i \rho_i}{\partial t} + \nabla \alpha_i \rho_i \mathbf{U}_i = 0. \quad (77)$$

С помощью (9) запишем второе уравнение (77) в виде

$$\frac{\partial \rho \eta_i}{\partial t} + \nabla \eta_i \rho_i \mathbf{U}_i = 0. \quad (78)$$

Почленно продифференцируем (76) и $\frac{\partial \rho}{\partial t}$ заменим на $\nabla \rho \mathbf{U}$ с помощью (76). В результате получим

$$\rho \frac{\partial \eta_i}{\partial t} + \nabla \eta_i \rho (\mathbf{U}_i - \mathbf{U}) = 0. \quad (79)$$

Уравнение (79) совпадает со вторым уравнением (76), если

$$J = -\eta_i \rho (\mathbf{U} - \mathbf{U}_i).$$

Таким образом, если коэффициент диффузии определить уравнением

$$D_0 \nabla \eta_i = -\eta_i (\mathbf{U} - \mathbf{U}_i),$$

то диффузия будет описываться одинаково моделью МКС и диффузионной моделью [32]. На деле же совпадения не будет, так как в диффузионных моделях, как правило, D_0 не зависит от разности скоростей.

Уравнение фильтрации Дарси (H. Darcy) [12] получается из рассмотренной модели в предположении стационарности течения. В (23) и (24) полагается

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

В (23) дополнительно предполагается

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

После таких упрощений уравнение (24) принимает вид

$$\nabla P_i = \mathbf{R}_i. \quad (80)$$

Подставив в (80) выражение для \mathbf{R}_i (18), приходим к уравнению

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

являющемуся основным уравнением фильтрации — так называемым законом Дарси (H. Darcy).

В случае с $N = 1$ уравнения (23)–(25) 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.).

Свойства модели. Изложенная в статье модель смеси идеальных сред допускает расширение [1]. Для описания поведения твердого тела, жидкости, плазмы и других состояний в уравнения импульса и энергии каждого компонента включаются девиатор тензора напряжений, теплопроводность, магнитное давление и Джоулево тепло и другие реальные свойства и процессы.

Компоненты дивергента тензора напряжений $S_{ik} = S_{ik1}n_1 + S_{ik2}n_2 + S_{ik3}n_3$ связаны с деформациями: упругость — законом Гука (R. Hooke), пластичность — условиями текучести, вязкость — уравнением для вязкости. Электрические и магнитные поля определяются уравнениями Максвелла (J. Maxwell), 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 (G. Galilei). Уравнения состояния компонентов могут быть сколь угодно сложными и описывать в равновесном приближении плавление, испарение и полиморфные фазовые переходы [33, 34].

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 [15, 16].

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований — гранты № 10-01-00032 и № 10-01-96001.

Обозначения

a_{ij} , b_{ij} , c_{ij} — функции в уравнениях парного взаимодействия i -го и j -го компонентов; C — скорость звука; D — скорость перемещения сильного разрыва; D_0 — коэффициент диффузии; E — удельная внутренняя энергия смеси (на единицу массы); f_{ij} — функция в уравнении объемной концентрации; H — неравновесная кинетическая энергия смеси; J — поток примеси; K — количество движения; M — масса сплошной среды; M_i — масса i -го компонента; m_v — масса v -й молекулы; N — число компонентов смеси; n — число молекул в объеме θ ; P — давление; Q_0 — энергия молекул; Q — обмен энергией при кластерном взаимодействии; q — внутренняя энергия; R_{ij} — функция обмена импульсом при парном взаимодействии; S — энтропия; S_{ik} — компоненты дивергента тензора напряжений; T — температура; t — время; U — скорость; V — удельный объем; W — скорость распространения сильного разрыва; α — объемная концентрация; β , γ — параметры функции взаимодействия компонентов; ϵ — удельная полная энергия смеси (на единицу массы); η — массовая концентрация; θ — объем смеси; ρ — плотность; τ_{ij} — время релаксации; ϕ_{ij} — элемент тензора взаимодействия компонентов; Φ_{ij} — обмен энергией между i -м и j -м компонентами. Индексы: i, j — номера компонентов смеси; v — номер молекулы; л — левый; п — правый; к, г — контактная граница.

Литература

1. Куропатенко В. Ф. Мезомеханика однокомпонентных и многокомпонентных материалов//Физическая мезомеханика. 2001. Т. 4, № 3. С. 49–55.
2. Овсянников Л. В. Лекции по основам газовой динамики. М.: Наука, 1981.
3. Harlow F. H., Dickman D. O., Harris D. E., and Martin R. E. Two dimensional hydrodynamic calculation. Los Alamos Scientific Lab. Rep NLA-2301, 1959.
4. Харлоу Ф. Х. Численный метод "частиц в ячейках" для задач гидродинамики. Вычислительные методы в гидродинамике/Под ред. С. С. Григоряна и Ю. Д. Шмыглевского. М.: Мир, 1967.
5. Вычислительные методы в физике плазмы/Под ред. Б. Олдера, С. Феррибаха, М. Ротенберга. М.: Мир, 1974.
6. Хокни Р., Иствуд Дж. Численное моделирование методом частиц. М.: Мир, 1987.
7. Alder B. J. and Wenwright. Studies in molecular dynamics. I. General method//J. Chem. Phys. 1959. Vol. 31, No. 2. Pp. 459–466.
8. Verlet L. Computer "experiments" on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules//Phys. Rev. 1967. Vol. 159, No. 1. Pp. 98–103.
9. Панин В. Е., Лихачев В. А., Гриняев Ю. В. Структурные уровни деформации твердых тел. Новосибирск: Наука, 1985.
10. Панин В. Е., Егорушкин В. Е., Макаров П. В. и др. Физическая мезомеханика и компьютерное конструирование материалов. Новосибирск: Наука, 1995.
11. Механика — от дискретного к сплошному/Под ред. В. М. Фомина. Новосибирск: Наука, 2008.
12. Нигматулин Р. И. Основы механики гетерогенных сред. М.: Наука, 1978.
13. Куропатенко В. Ф. Модели механики сплошных сред. Челябинск: Челябинский гос. ун-т, 2007.
14. Рахматуллин Х. А. Основы газодинамики взаимодействующих движений сжимаемых сред//ПММ. 1956. Т. 20, вып. 27. С. 184–195.
15. 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.

16. Яненко Н. Н., Солоухин Р. И., Папырин А. Н., Фомин В. М. Сверхзвуковые двухфазные течения в условиях скоростной неравновесности частиц. Новосибирск: Наука, 1980.
17. Куропатенко В. Ф. Модель многокомпонентной среды//ДАН. 2005. Т. 403, № 6. С. 761–763.
18. Струминский В. В. Влияние диффузной скорости на течение газовых смесей//ПММ. 1974. Т. 38, вып. 2. С. 203–210.
19. Гиршфельдер Д., Кертис Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей. М.: ИЛ, 1961.
20. Френкель Я. И. Статистическая физика. М.: Изд-во АН СССР, 1948.
21. Радченко И. В. Молекулярная физика. М.: Наука, 1965.
22. Николаевский В. Н. Гидродинамический анализ ударных адиабат гетерогенных смесей веществ//ПМТФ. 1969. № 3. С. 82–88.
23. Дремин А. Н., Карсунин И. А. Метод определения ударных адиабат для дисперсных веществ//ПМТФ. 1960. № 3. С. 45–49.
24. Богачев Г. Н., Николаевский В. Н. Ударные волны в смеси материалов. Гидродинамические приближения//Изв. АН СССР. МЖГ. 1976. № 4. С. 113–125.
25. Ляхов Г. М. Волны в грунтах и пористых многокомпонентных средах. М.: Наука, 1982.
26. Алексеев Ю. Ф., Альтшулер Л. В., Крупникова В. П. Ударное сжатие двухкомпонентных парафино-вольфрамовых смесей//ПМТФ. 1971. № 4. С. 496–500.
27. Мак-кунн Р., Марш С., Тейлор Дж. Высокоскоростные ударные явления. М.: Мир, 1973.
28. Долгобородов А. Ю., Воскобойников И. М., Толстов И. К., Стариков А. В. Особенности распространения ударных волн в смесях//ФГВ. 1992. Т. 28. № 3. С. 106–111.
29. Ляхов Г. М., Охитин В. Н. Сферические взрывные волны в многокомпонентных средах//ПМТФ. 1974. № 2. С. 75–84.
30. Накоряков В. Е., Покусаев Б. Г., Шрейбер И. Р. Волновая динамика газо- и парожидкостных сред. М.: Энергоатомиздат, 1990.
31. Лойцянский Л. Г. Механика жидкости и газа. М.: Наука, 1987.
32. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Гидродинамика. М.: Наука, 1986.
33. Куропатенко В. Ф. Уравнения состояния в математических моделях механики и физики//Экстремальные состояния вещества: Сб. науч. тр. АН СССР. М.: ИВТАН. 1991. С. 3–38.
34. Куропатенко В. Ф. Уравнения состояния компонентов плотной низкотемпературной плазмы. Энциклопедия низкотемпературной плазмы. Серия Б, Т. VII-1. М.: Янус-К, 2008. С. 436–450.