

СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ ТЕОРИИ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СРЕД

В.Ф. Куропатенко

Российский Федеральный ядерный центр –
Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики
454067, г. Снежинск, Челябинская обл., а/я 245
тел. (35146)55153, V.F.Kuropatenko@vniitf.ru

Необходимость моделирования поведения многокомпонентных сред (МКС) возникает во многих областях человеческой деятельности [1]. Это порождает возникновение различных моделей МКС, предназначенных для моделирования ее поведения при внешних воздействиях. Вообще говоря, разные компоненты МКС различаются теплоемкостями, скоростями звука, сжимаемостями и другими физическими характеристиками. Поэтому 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.

В настоящее время для моделирования поведения МКС применяются различные модели 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 имеющими одинаковые температуры и давления. При этом для описания перемешивания компонентов используется уравнение диффузии (модели Дарси, Баклея–Левретта и др. [2]). 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. Следует обращать внимание, чтобы при переходе от общей модели к частной не возникало физических противоречий, как в диффузионных моделях. Каждый i -й компонент характеризуется набором физических величин P_i , ρ_i , E_i , \bar{U}_i , S_i и др. и набором парциальных величин $\alpha_i P_i$, $\alpha_i \rho_i$, $\eta_i E_i$, $\eta_i \bar{U}_i$, $\eta_i S_i$ и др., где α_i и η_i объемная и массовая концентрации. Каждый компонент сохраняет свои

физические свойства и имеет уравнение состояния. При отсутствии химических реакций законы сохранения массы, количества движения и энергии i -го компонента имеют вид

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

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_i \rho_i \bar{U}_i) + \frac{\partial}{\partial x_k}(\alpha_i (\rho_i \bar{U}_i U_{ki} + \bar{F}_{ki} + \bar{S}_{ki})) + \nabla \alpha_i P_i - \alpha_i \bar{R}_i = \nabla \alpha_i P_{im}, \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_i \rho_i \varepsilon_i) + \nabla \alpha_i (P_i \bar{U}_i + \rho_i \varepsilon_i \bar{U}_i + \bar{Q}_i - K_i \nabla T_i) + \frac{\partial}{\partial x_k} \alpha_i (\bar{F}_{ki} \bar{U}_i + \bar{S}_{ki} \bar{U}_i) - \alpha_i \Phi_i - \alpha_i A_i = \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_i \rho_i Q_{iD}). \quad (3)$$

По индексу $k = 1, 2, 3$ предполагается суммирование. К законам сохранения (1)–(3) добавляются:
– уравнения состояния $P_i(\rho_i, E_i)$, $T_i(\rho_i, E_i)$, (4)
– функции парного взаимодействия

$$\bar{R}_i = \sum_{j=1}^N \alpha_j \frac{a_{ij}}{\tau_{ij}^u} (\bar{U}_j - \bar{U}_i),$$

$$\Phi_i = \sum_{j=1}^N \alpha_j \left(\frac{b_{ij}}{\tau_{ij}^p} (P_j - P_i) - \frac{c_{ij}}{\tau_{ij}^T} (T_j - T_i) \right), \quad (5)$$

– функции кластерного взаимодействия

$$\bar{F}_{ki} = -0.5 \rho_i (U_k - U_{ki}) (\bar{U} - \bar{U}_i),$$

$$\bar{Q}_i = 0,5 (\bar{U} - \bar{U}_i) (P_i + \rho_i E_i). \quad (6)$$

– девиатор $\bar{S}_{ki} = S_{k1i} \bar{n}_1 + S_{k2i} \bar{n}_2 + S_{k3i} \bar{n}_3$ тензора напряжений, где S_{kli} ($l = 1, 2$) зависит от деформаций или скоростей деформаций,
– потоки тепла $\bar{q}_i = K_i \nabla T_i$,
– магнитное давление P_m и Джоулево тепло Q_{iD} .

В случае идеальной сплошной среды ($\bar{S}_{ki} = 0$, $P_{im} = 0$, $\bar{Q}_{iD} = 0$, $K_i \nabla T_i = 0$) уравнение для объемных концентраций α_i имеет вид

$$P_i \left(\frac{\partial \alpha_i}{\partial t} + \bar{U}_i \nabla \alpha_i \right) - \left(\frac{P_i}{\rho_i} + E_i \right) \nabla \alpha_i \rho_i (\bar{U} - \bar{U}_i) + \alpha_i (\Phi_i + A_i - \bar{R}_i \bar{U}_i) = 0, \quad (7)$$

Функции парных взаимодействий достаточно хорошо изучены теоретически [7]. Функции кластерных взаимодействий являются следствиями двух гипотез:

– каждый закон сохранения смеси должен получаться суммированием соответствующих законов сохранения компонентов [1, 6].

– все законы сохранения компонентов и смеси должны быть инвариантны к преобразованиям Галилея [1, 6].

Уравнения (1)–(3) этим требованиям удовлетворяют только в случае, когда F_i и \bar{Q}_i , имеют вид (6).

Силы \bar{F}_{ki} и потоки энергии \bar{Q}_{ki} являются новыми по сравнению с другими моделями МКС и не зависят от индивидуальных свойств компонентов, таких как скорость звука, теплоемкость, размер, форма и шероховатость поверхности частиц и т.д. Если скорости компонентов одинаковы, то \bar{F}_{ki} и \bar{Q}_{ki} обращаются в ноль. Этим кластерное взаимодействие отличается от парного, при котором функции a_{ij} , b_{ij} , c_{ij} , τ_{ij}^U , τ_{ij}^P , τ_{ij}^T в (5) зависят от конкретных свойств взаимодействующих компонентов.

Выражение сил \bar{F}_{ki} получаются также путем рассмотрения взаимодействия компонентов со стенками сосуда, в котором содержится смесь. Для перехода с уровня компоненты на уровень смеси делается несколько упрощающих предположений:

- компонента является большой частицей.
- взаимодействие компоненты со стенками сосуда неупругое и, следовательно, часть кинетической энергии переходит во внутреннюю энергию.
- изменение количества движения при взаимодействии со стенкой при нормальном и касательном ударе различны.

Ограничимся простейшими законами взаимодействия при отражении

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

и при касании

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

Здесь \bar{U}_i и \bar{U} – скорости i -го компонента и стенки до соударения, U_i^f – скорость i -го компонента после соударения, $0 < \gamma < 1$, $0 < \beta < 1$. Скорость стенки \bar{U} является барицентрической скоростью МКС. Она определяется по формуле

$$\bar{U} = \sum_{i=1}^N \eta_i \bar{U}_i,$$

где N – число компонентов. Силу, которая действует со стороны стенки на i -ю компоненту и изменяет ее количество движения, найдем по аналогии с молекулярно-кинетическими моделями идеального газа. Время действия касательных сил считаем пропорциональным времени действия нормальной силы

$$\Delta M_{ixy} = \Delta M_{ixz} = R(\beta)\Delta M_{ixx}.$$

Уточнить значения γ , β и $R(\beta)$ с помощью теории не удастся.

Тем не менее, анализ полученных выражений компонентов тензора взаимодействия показывает, что когда $\gamma = 0,5$; $R = 2(1-\beta)/3$ выражение \bar{F}_{ki} строго совпадает с полученным на макроуровне выражением (6). Совершенно разные способы получения кластерного взаимодействия привели к одному и тому же результату. Это отчасти можно объяснить тем, что в обоих рассмотренных строго выполняются законы сохранения массы, импульса и энергии.

Расчеты волны разрежения в смеси газов, проведенные с применением этой модели, показывают, что легкие компоненты двигаются с большими ускорениями, чем тяжелые, скорости компонентов в теле волны разрежения различаются, тем самым возникают не равные нулю силы \bar{F}_{ki} и потоки \bar{Q}_i . На поверхности выдвигающегося поршня скорости компонентов выравниваются, однако массовая концентрация легкого газа оказывается выше, чем в исходном газе. Модель была применена также для расчетов фильтрации разных газов через пористый неподвижный бетон. Результаты расчетов хорошо согласуются с результатами экспериментов.

В случае $N = 1$ уравнения (1)–(3) 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.).

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, грант № 07-01-00378, грант № 07-01-96011

ЛИТЕРАТУРА

1. Куропатенко В.Ф. Модели механики сплошных сред. Челябинск: Челяб. гос. ун-т, 2007. 302 с.
2. Нигматулин Р.И. Основы механики гетерогенных сред. М.: Наука, 1978. 332 с.
3. Рахматуллин Х.А. Основы газодинамики взаимодействующих 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., Паньрин 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.