

УДК 535.529: 541.64

РОЛЬ ЭФФЕКТОВ НЕЛОКАЛЬНОСТИ И ЗАПАЗДЫВАНИЯ В ПРОЦЕССАХ ПЕРЕНОСА В СРЕДАХ С МИКРОСТРУКТУРОЙ

В. И. Попов

Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН, 630090 Новосибирск

Исследована роль эффектов нелокальности и запаздывания в необратимых процессах переноса при учете неравновесных явлений в микроструктуре среды. На примере изотермической реакции среды на мгновенное возмущение скорости сдвига изучена эволюция компонент тензора напряжений. Показано, что в среде постоянной плотности ее напряженное состояние характеризуется касательным напряжением сдвига, первой и второй разностями нормальных напряжений и их переходом к равновесным значениям в результате колебательного процесса с затухающей амплитудой. При этом термодинамические переменные состояния (тензор давления, внутренняя энергия) зависят от скорости сдвига и времени. Установлено, что для микроструктурных сред приближения локально-равновесной термодинамики возможны в том случае, если их времена релаксации на порядок меньше характерного времени задачи.

Существуют различные типы течений жидкостей, для которых адекватное моделирование термомеханических процессов переноса может быть осуществлено лишь с учетом изменения числа микроструктурных состояний.

В работе [1] предложена модель замыкания законов сохранения вещества и импульса в химически активных средах с микроструктурой. Модель включает эволюцию непрерывного внутреннего параметра среды, обусловленную изменением ее микросостояния (первых моментов локальной функции распределения микроскопической плотности вероятности кинетических элементов течения при нелокальном взаимодействии сдвиговых, энтропийных и диффузионных сил). Микросостояние среды имеет равновесный масштаб порядка λD , термодинамические переменные, зависящие от начальных значений внутреннего параметра, определяются характером его изменения в процессе перехода к состоянию равновесия на временном масштабе λ/τ_* (λ — характерное время релаксации; D — коэффициент диффузии; τ_* — характерное время неравновесного макроскопического процесса).

Микроструктура среды рассматривается как совокупность однородных броуновских эффективных узлов трения, соединенных эластичными субцепями, погруженными в бесструктурную жидкость. Выбор такой структуры среды обусловлен тем, что в условиях сдвига проявляются ее характерные макроскопические свойства — вязкость и упругость.

Приближение значения внутреннего параметра к равновесному определяет характер неравновесного переноса и соответствующие потоки в системе в целом.

Особенностью подхода, при котором термодинамическая теория необратимых процессов описывает не только неравновесные процессы переноса, но и такие неравновесные явления, как переменность (конфигурационные изменения, искажения) микроструктуры среды, является отступление от принципа локального термодинамического равновесия.

Известно, что принцип локального термодинамического равновесия, используемый при описании достаточно медленных течений, допускает неравновесность [2] — зависимость макроскопических переменных состояния от координаты точки пространства-времени, но в малых пространственных масштабах, для которых записываются законы

сохранения, ограничивает зависимость между этими переменными соотношениями равновесной термодинамики вида $f(P, \rho, T) = 0$. Для микроструктурных сред характерен нелокальный механизм взаимодействия полей: давление, температура, скорость деформации в точке пространства-времени зависят от внутреннего параметра, релаксирующего в окрестности этой точки. Поэтому термодинамические переменные даже в малом не являются той же функцией состояния, что и в равновесном состоянии: микроструктура не успевает адаптироваться к новому равновесному состоянию. При изучении динамики таких систем должна учитываться временная зависимость между термодинамическими переменными. Нелокальность термодинамических переменных обуславливает переход макроскопической системы в новое равновесное состояние со своим для каждой переменной временем релаксации. Поэтому в механических, а также в тепло- и массообменных процессах эффекты запаздывания переноса количества движения, тепла, массы проявляются в “задержке” текучести, упругости, теплопроводности или в возникновении эластической, инерционной турбулентности.

Ниже рассмотрен пример изотермической реакции среды постоянной плотности на мгновенное возмущение из состояния покоя до состояния, характеризуемого значением $\dot{v}_{ij} = G = \text{const}$ (G — градиент скорости сдвига). Получены зависимости для компонент, характеризующих изменение микросостояния среды, изучена эволюция измеряемых в опытах компоненты тензора касательных напряжений $\tau_{12}(t) = \tau_{21}(t)$ и разностей нормальных напряжений $\sigma_1(t) = P_{11} - P_{22}$ (первая разность) и $\sigma_2(t) = P_{22} - P_{33}$ (вторая разность), а также изменение теплосодержания единицы объема среды во времени.

В отличие от [1] изменение динамических переменных системы рассмотрено с учетом кинетической жесткости микроструктуры среды [3]. В этом случае помимо перечисленных выше сил вводится сила в виде $f_4 = \alpha \zeta x_j \dot{e}_{ij}$. Здесь α — кинетическая жесткость (сопротивляемость микроструктуры среды сдвиговым деформациям); $\dot{e}_{ij} = 0,5G$ — симметричная часть тензора градиента скорости сдвига; $x_j \dot{e}_{ij}$ — вектор скорости смещения; ζ — коэффициент вязкого трения узлов (эффективных кинетических элементов) с бесструктурной жидкостью.

В рассматриваемой задаче динамическое уравнение, полный тензор напряжений в предположении $\tau_{ij} \gg 2\mu \dot{e}_{ij}$ (τ_{ij} — недевиаторное избыточное напряжение; $2\mu \dot{e}_{ij}$ — тензор вязких напряжений; μ — вязкость среды, определяемая на основе известной кинематики) и реокинетическое выражение при отсутствии химических реакций имеют вид [3, 4]

$$\partial_j P_{ij} = 0 \quad (P_{ij} = -p^* \delta_{ij} + \tau_{ij}); \quad (1)$$

$$P_{ij} = -p^* \delta_{ij} + \varepsilon (\langle x_i x_j \rangle - \delta_{ij}) + \eta (\langle x_i x_k \rangle \dot{e}_{kj} + \dot{e}_{ik} \langle x_k x_j \rangle); \quad (2)$$

$$d_t \langle x_i x_j \rangle = \langle x_j x_k \rangle (\dot{v}_{ki} - \alpha \dot{e}_{ki}) + \langle x_k x_i \rangle (\dot{v}_{kj} - \alpha \dot{e}_{kj}) - 2\alpha^{-1} (\langle x_i x_j \rangle - \delta_{ij}). \quad (3)$$

Здесь P_{ij} — тензор полных напряжений; p^* — произвольный скаляр; $\langle x_i x_j \rangle = \int x_i x_j W(\mathbf{x}, t) dv$ — момент $W(\mathbf{x}, t)$; $W(\mathbf{x}, t)$ — функция распределения плотности вероятности узлов трения в пространстве конфигурации в момент времени t (локальная микроскопическая плотность вероятности, характеризующая структуру среды); δ_{ij} — символ Кронекера; $\eta = 0,5\alpha\varepsilon\alpha$ — внутренняя вязкость, зависящая от кинетической жесткости структурных элементов; α — время релаксации (время внутренних структурных перестроек после приложения (снятия) деформации); ε — модуль упругости среды.

Система уравнений (1)–(3) содержит недевиаторные избыточные напряжения τ_{ij} , т. е. след тензора τ_{ij} не равен нулю. Вследствие этого величина p^* не является (в отличие от классической термодинамики) независимой переменной состояния. Она должна рассматриваться как самостоятельная неизвестная переменная механической природы и определяться в зависимости от условий задачи. Поэтому в уравнениях (1), (2) $p^*(G, t) = p + \tau_{ii}/3$ [5].

Здесь p — гидростатическое давление, которое определяет тензор полных напряжений через девиаторный тензор; $\tau_{ii}/3$ — след тензора τ_{ij} .

В адиабатическом режиме деформирования среды с постоянной плотностью соотношение для интенсивности преобразования механической энергии в тепловую можно представить в виде

$$\rho C_p d_t T = \tau_{ij}^1 \dot{v}_{ij}, \quad (4)$$

где $\tau_{ij}^1 = \tau_{ij} - \tau_{ii}/3$ — девиаторное напряжение; T — температура, соответствующая средней кинетической энергии и пропорциональная квадрату диффузионной скорости [1]; ρ — плотность; C_p — удельная теплоемкость.

Возникновение нормальных напряжений обусловлено тем, что среда накапливает внутреннюю энергию в упругой форме, имеющей тепловую природу. Вследствие этого правый член уравнения (4), вообще говоря, представляет собой сумму диссипации и накопленной упругой энергии, например в виде разности нормальных напряжений.

Для рассматриваемого типа течения из соотношения (3) следует система уравнений для $\langle x_i x_j \rangle$

$$\begin{aligned} d_t \langle x_1^2 \rangle + 2\alpha^{-1}(\langle x_1^2 \rangle - 1) &= 2\langle x_1 x_2 \rangle G(1 - 0,5\alpha), & d_t \langle x_2^2 \rangle + 2\alpha^{-1}(\langle x_2^2 \rangle - 1) &= -\langle x_1 x_2 \rangle \alpha G, \\ d_t \langle x_3^2 \rangle + 2\alpha^{-1}(\langle x_3^2 \rangle - 1) &= 0, & d_t \langle x_1 x_2 \rangle + 2\alpha^{-1} \langle x_1 x_2 \rangle &= \langle x_2^2 \rangle G(1 - 0,5\alpha) - 0,5\alpha G \langle x_1^2 \rangle, \\ d_t \langle x_2 x_3 \rangle + 2\alpha^{-1} \langle x_2 x_3 \rangle &= -0,5\alpha G \langle x_1 x_3 \rangle, & d_t \langle x_1 x_3 \rangle + 2\alpha^{-1} \langle x_1 x_3 \rangle &= \langle x_2 x_3 \rangle G(1 - 0,5\alpha). \end{aligned} \quad (5)$$

Из системы неоднородных дифференциальных уравнений при условии $t = 0$, $\langle x_i x_i \rangle = 1$, $\langle x_i x_j \rangle = 0$ методом вариации произвольных постоянных находим компоненты матрицы моментов функции распределения $\|\langle x_i x_j \rangle\|$ [4]

$$\begin{aligned} \langle x_1^2 \rangle &= 0,5b^{-1}(A + 2\alpha^{-1}B - a + b), & \langle x_2^2 \rangle &= 0,5a^{-1}(A + 2\alpha^{-1}B + a - b), & \langle x_3^2 \rangle &= 1, \\ \langle x_2 x_3 \rangle &= \langle x_3 x_2 \rangle = \langle x_1 x_3 \rangle = \langle x_3 x_1 \rangle &= 0, & \langle x_1 x_2 \rangle &= B, \\ A &= \gamma r_1 \exp(r_1 t) + \beta r_2 \exp(r_2 t), & B &= 2(a + b)/(r_1 r_2 \alpha) + \gamma \exp(r_1 t) + \beta \exp(r_2 t), \\ r_{1,2} &= -2\alpha^{-1} \pm 2(ab)^{0,5}, & \gamma &= -(a + b)(1 + 2/(\alpha r_1))/(r_2 - r_1), \\ \beta &= (a + b)(1 + 2/(\alpha r_2))/(r_2 - r_1), & a &= G(1 - 0,5\alpha), & b &= -0,5\alpha G. \end{aligned} \quad (6)$$

Соотношения (6) характеризуют искажения микроструктуры среды во времени в результате ее мгновенного возмущения однородной скоростью сдвига. Сдвиг влияет на микроструктуру жидкости и соответственно на макроскопические характеристики переноса.

В соответствии с (2) компоненты тензора напряжений $\|P_{ij}\|$ принимают вид

$$\begin{aligned} P_{11} &= -p^* + \varepsilon(\langle x_1^2 \rangle - 1) - \alpha \varepsilon b \langle x_1 x_2 \rangle, & P_{22} &= -p^* + \varepsilon(\langle x_2^2 \rangle - 1) - \alpha \varepsilon b \langle x_1 x_2 \rangle, \\ P_{33} &= -p^*, & P_{12} &= \varepsilon \langle x_1 x_2 \rangle - 0,5\alpha \varepsilon b (\langle x_1^2 \rangle - \langle x_2^2 \rangle), & P_{23} &= P_{13} = 0. \end{aligned} \quad (7)$$

В экспериментах обычно измеряются разности нормальных напряжений $\sigma_1 = P_{11} - P_{22}$ (первая), $\sigma_2 = P_{22} - P_{33}$ (вторая), а также касательное напряжение сдвига τ_{12} :

$$\begin{aligned} P_{11} - P_{22} &= \varepsilon(\langle x_1^2 \rangle - \langle x_2^2 \rangle), & P_{22} - P_{33} &= \varepsilon[(\langle x_2^2 \rangle - 1) - \alpha b \langle x_1 x_2 \rangle], \\ P_{12} &\equiv \tau_{12} = \varepsilon[\langle x_1 x_2 \rangle - 0,5\alpha b (\langle x_1^2 \rangle - \langle x_2^2 \rangle)]. \end{aligned} \quad (8)$$

На рис. 1 представлены результаты расчетов по формулам (8) в случае мгновенно приложенного и затем снятого постоянного градиента скорости сдвига $G = 11,42 \text{ с}^{-1}$. Видно, что значения механических характеристик системы переходят к равновесным значениям со своим временем релаксации. Колебательный режим перехода с затухающей амплитудой

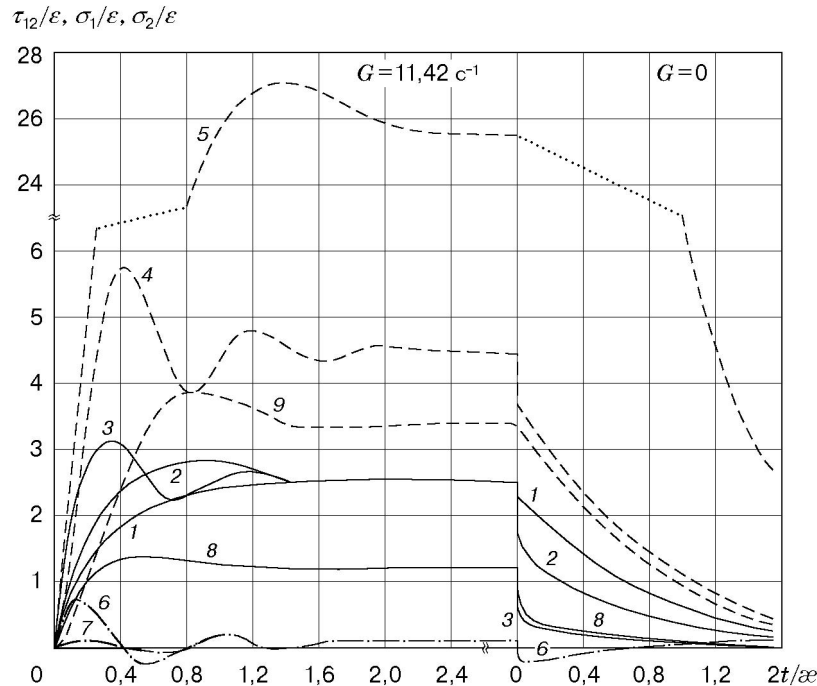


Рис. 1. Зависимости τ_{12}/ε , σ_1/ε , σ_2/ε от параметра $2t/\varepsilon$, рассчитанные по формулам (8) в случае мгновенно приложенного (слева) и затем снятого (справа) постоянного градиента скорости сдвига:

1, 2, 3, 8 — τ_{12}/ε (1 — $\varkappa = 0,8$, $\alpha = 10^{-3}$; 2 — $\varkappa = 0,8$, $\alpha = 10^{-2}$; 3 — $\varkappa = 0,8$, $\alpha = 10^{-1}$;
 8 — $\varkappa = 0,4$, $\alpha = 10^{-1}$); 4, 5, 9 — σ_1/ε (4 — $\varkappa = 0,8$, $\alpha = 10^{-1}$; 5 — $\varkappa = 0,8$, $\alpha = 10^{-2}$;
 9 — $\varkappa = 0,4$, $\alpha = 10^{-1}$); 6, 7 — σ_2/ε (6 — $\varkappa = 0,8$, $\alpha = 10^{-1}$; 7 — $\varkappa = 0,8$, $\alpha = 10^{-2}$)

указывает на существование в системе корреляционных моментов ближнего порядка, что характерно для текучих сред с микроструктурой.

Анализ результатов показал, что величина σ_1 зависит от отклонения микроструктуры среды от положения равновесия, а величина σ_2 определяется скоростью отклонения. Вторая разность нормальных напряжений зависит от кинетической жесткости цепей, и ее влияние проявляется лишь на нестационарной стадии деформирования.

Введение в реокинетическую модель дополнительной силы f_4 , зависящей от жесткости эластичной микроструктуры, не меняет ее наиболее вероятного равновесного состояния: под действием постоянного градиента скорости G изменяется лишь скорость перехода из одного конфигурационного состояния в другое. Таким образом, после введения жесткости в микроструктуру среды энтропия ее наиболее вероятного состояния сохраняется, меняется лишь скорость конфигурационных преобразований.

Скорость необратимого превращения механической энергии во внутреннюю энергию среды находится из соотношений (2)–(7) при условии $\alpha = 0$.

Из (4) при $\dot{v}_{ij} \equiv G$ и $t = 0$, $T = T_0$ (T_0 — начальная температура) следует

$$4\rho C_p(T - T_0)/(\varepsilon \varkappa^2 G^2) = 2t/\varepsilon + \exp(-2t/\varepsilon) - 1.$$

На рис. 2 представлена зависимость между термодинамическими переменными в виде

$$H \equiv 1,5(p^* - p)/(\rho C_p(T - T_0)) = [1 - \exp(-2t/\varepsilon) - (2t/\varepsilon) \exp(-2t/\varepsilon)] [2t/\varepsilon + \exp(-2t/\varepsilon) - 1]^{-1}.$$

Видно, что при мгновенном возмущении системы однородной скоростью сдвига имеет место нелинейная временная зависимость между термодинамическими переменными. Ре-

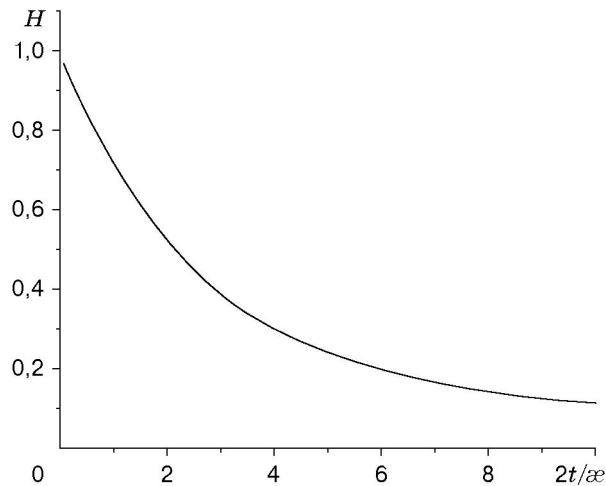


Рис. 2. Нелинейная временная зависимость между термодинамическими переменными

акция рассматриваемой макросистемы на механическое и тепловое возмущение зависит от времени внутренних структурных перестроек. В области $2t/\varepsilon > 10$ справедливы приближения локально-равновесной термодинамики.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Попов В. И.** Реокинетика переноса вещества и импульса в химически активных средах с микроструктурой // Теплофизика и аэромеханика. 2001. Т. 8, № 2. С. 269–281.
2. **Де Гроот С., Мазур П.** Неравновесная термодинамика. М.: Мир, 1964.
3. **Гроссман А. Г., Попов В. И.** К выводу реологического соотношения для концентрированных растворов полимеров // ПМТФ. 1976. № 2. С. 126–132.
4. **Кекалов А. Н., Попов В. И.** Структурно-феноменологическая модель и некоторые результаты исследования характеристик течения концентрированных растворов высокополимеров // Изв. АН СССР. Механика жидкости и газа. 1984. № 1. С. 105–110.
5. **Астарита Дж., Марруччи Дж.** Основы гидромеханики неньютоновских жидкостей. М.: Мир, 1978.

*Поступила в редакцию 14/II 2002 г.,
в окончательном варианте — 28/III 2002 г.*