УДК 532.529

ОБМЕН ИМПУЛЬСОМ И ЭНЕРГИЕЙ В НЕРАВНОВЕСНЫХ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СРЕДАХ

В. Ф. Куропатенко

Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики, 456770 Снежинск
E-mail: v.f.kuropatenko@vniitf.ru

В многокомпонентных средах равновесное состояние определяется термодинамическими условиями равновесия в виде равенства давлений и температур компонентов, принципом максимума энтропии смеси (или минимума свободной энергии) и равенством скоростей компонентов. В законах сохранения компонентов учитывается их взаимодействие друг с другом в виде сил и потоков энергии, содержащих разности скоростей, давлений и температур компонентов. Рассматривается также форма обмена импульсом и энергией между каждым компонентом и сплошной средой, выражающей коллективные свойства ансамбля компонентов. Показано, что эти потоки импульса и энергии отличны от нуля только в неравновесных по скоростям состояниях многокомпонентной среды.

Ключевые слова: равновесие, многокомпонентная многофазная среда, взаимодействие компонентов, замыкание системы уравнений.

Введение. Огромное многообразие многокомпонентных сред (МКС) естественного и искусственного происхождения делает задачу их изучения чрезвычайно сложной. Особенно сложны динамические процессы в МКС, сопровождающиеся фазовыми переходами отдельных компонентов. Компоненты двигаются со своими скоростями, что приводит к изменениям их концентраций в пространстве координаты — время. В результате взаимодействия компонентов неравновесная МКС за некоторое время релаксации переходит в состояние равновесия. Процессы релаксации давлений, температур и скоростей в МКС изучались как для конкретных смесей, так и в общей постановке [1–7]. При этом, как правило, предполагалось, что сумма функций, определяющих обмен импульсом и энергией между всеми компонентами смеси, равна нулю. Это создавало затруднения при определении роста энтропии МКС в процессе релаксации. Введение в рассмотрение неравновесной кинетической энергии отчасти снимает эти затруднения.

Ниже будут рассматриваться вопросы, возникающие при разработке моделей сплошной среды, основанных на гипотезе взаимодействующих континуумов [1]. В таких моделях компоненты являются структурными элементами МКС, одновременно присутствующими в каждой точке объема. Используя их характеристики, можно с помощью операций осреднения перейти от характеристик компонентов к характеристикам некоторой сплошной среды, которые, как и характеристики компонентов, будут непрерывны в четырехмерном пространстве x_1, x_2, x_3, t. Следовательно, для них могут быть записаны законы сохранения. Сплошную среду, характеристики которой получены с помощью операций осреднения соответствующих характеристик компонентов смеси, будем называть виртуальной сплошной средой (ВСС). По-видимому, одним из условий эквивалентности ВСС и МКС является

Работа выполнена при финансовой поддержке МНТЦ (проект № 1181) и Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 04-01-00050).

проявление на макроуровне происходящих в МКС процессов взаимодействия компонентов. Иными словами, законы сохранения ВСС не могут не зависеть от законов сохранения компонентов.

Основные требования, которым должны удовлетворять модели МКС, следующие:

1. Каждый компонент с номером i ($i = 1, 2, \ldots, N$) характеризуется объемной (α_i) и массовой (η_i) концентрациями, удовлетворяющими условиям

$$\sum_{i=1}^{N} \alpha_i = 1, \qquad \sum_{i=1}^{N} \eta_i = 1. \tag{1}$$

2. Для каждого i-го компонента имеется полный набор характеристик — плотность ρ_i, давление P_i, температура T_i, внутренняя энергия E_i, энтропия S_i, скорость $\boldsymbol{U}_i$, кинетическая энергия $K_i = 0{,}5|\boldsymbol{U}_i|^2$, полная энергия $\varepsilon_i = E_i + K_i$ и др.

3. Для каждого компонента тензор напряжений делится на шаровую часть и девиатор.

4. Термодинамические величины (P_i, ρ_i, E_i, T_i, S_i и др.) связаны уравнениями состояния. Современные уравнения состояния [8] позволяют описать полиморфные фазовые переходы, плавление, испарение, ионизацию, что существенно расширяет область применимости моделей МКС.

5. Если значения P, T и $\boldsymbol{U}$ компонентов с номерами i и j различаются, то между компонентами возникают процессы обмена импульсом и энергией.

Сплошная среда компонента. Будем следовать хорошо изученному подходу [2–7] к описанию законов сохранения компонентов. Предполагается, что удельные физические величины (в единице объема i-го компонента) после умножения на объемную концентрацию становятся непрерывными в объеме, занятом смесью. К ним относятся как основные величины ($\alpha_i\rho_i$, $\alpha_i P_i$, $\alpha_i\rho_i\boldsymbol{U}_i$, $\alpha_i\rho_i E_i$, $\alpha_i\rho_i K_i$, $\alpha_i\rho_i S_i$, $\alpha_i\rho_i T_i$), так и ряд других комбинаций удельных (в единице объема) параметров.

Далее будем рассматривать смесь сред без учета турбулентности, теплопроводности, воздействия полей и химических реакций. При этих предположениях для идеальных сред получаются наиболее простые законы сохранения массы, импульса и энергии i-го компонента:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_i\rho_i) + \nabla\alpha_i\rho_i\boldsymbol{U}_i = 0; \tag{2}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_i\rho_i\boldsymbol{U}_i) + \frac{\partial}{\partial x_k}(\alpha_i\rho_i U_{ik}\boldsymbol{U}_i) + \nabla\alpha_i P_i = \alpha_i\boldsymbol{R}_i; \tag{3}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_i\rho_i\varepsilon_i) + \nabla(\alpha_i\boldsymbol{U}_i(P_i + \rho_i\varepsilon_i)) = \alpha_i\Phi_i. \tag{4}$$

Система (2)–(4) дополняется уравнением состояния i-го компонента

$$P_i = P_i(\rho_i, E_i) \tag{5}$$

и уравнениями для параметров $\boldsymbol{R}_i$ и Φ_i, которые определяют интенсивность обмена импульсом и энергией i-го компонента со всеми остальными.

Будем рассматривать МКС, в которых возможны неравновесности по параметрам P, T и $\boldsymbol{U}$. Это значит, что существуют три функции τ_P, τ_T, τ_U, характеризующие времена релаксации давления, температуры и скорости и зависящие от параметров взаимодействующих компонентов. В реальных физических процессах значения τ_P, τ_T, τ_U конечны. Имеется, однако, большое количество работ, посвященных так называемым асимптотическим моделям МКС, в которых либо все, либо часть времен релаксации полагаются равными нулю или бесконечности. В данной работе такие модели исключим из рассмотрения.

Поскольку МКС неравновесна, уравнения движения и энергии согласно теории неравновесных процессов [9] должны содержать силы и потоки, порождаемые конкретными видами неравновесностей. С этой точки зрения уравнения (3) и (4) нуждаются в уточнении. В них входит единственная сила P_i — шаровая часть тензора напряжений. Одним из видов взаимодействия компонентов является трение. Поэтому силу F_i, действующую на i-й компонент со стороны МКС, возьмем в наиболее общей форме и будем считать тензором. В уравнении (3) уже есть вектор $\boldsymbol{R}_i$, определяющий обмен импульсом i-го компонента с остальными компонентами МКС. Форма вектора $\boldsymbol{R}_i$ достаточно хорошо обоснована, однако добавление тензорной силы F_i расширяет возможности модели.

В уравнение (4) уже входит функция Φ_i, определяющая обмен энергией i-го компонента с остальными компонентами МКС из-за неравновесности по давлениям и температурам. Добавим еще поток энергии $\boldsymbol{Q}_i$, зависящий от неравновесности по скоростям. После введения силы F_i и потока $\boldsymbol{Q}_i$ уравнения движения (3) и энергии (4) запишутся в виде

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\alpha_i \rho_i \boldsymbol{U}_i\right) + \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\alpha_i \rho_i U_{ik} \boldsymbol{U}_i\right) + \nabla \alpha_i P_i + \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\alpha_i \boldsymbol{F}_{ik}\right) = \alpha_i \boldsymbol{R}_i; \tag{6}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\alpha_i \rho_i \varepsilon_i\right) + \nabla(\alpha_i \boldsymbol{U}_i (P_i + \rho_i \varepsilon_i)) + \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\alpha_i \boldsymbol{F}_{ik} \boldsymbol{U}_i\right) + \nabla \alpha_i \boldsymbol{Q}_i = \alpha_i \Phi_i. \tag{7}$$

Обменные члены $\boldsymbol{R}_i$, Φ_i. В подавляющем большинстве работ (см., например, [2–7]) предполагается, что обмен количеством движения и энергией между i-м и j-м компонентами МКС определяется вектором $\boldsymbol{R}_{ij}$ и функцией Φ_{ij}. Из законов сохранения следует, что

$$\boldsymbol{R}_{ij} = -\boldsymbol{R}_{ji}, \qquad \Phi_{ij} = -\Phi_{ji}. \tag{8}$$

При этом предполагается, что сам с собой компонент не взаимодействует и $\boldsymbol{R}_{ii} = 0$, $\Phi_{ii} = 0$. Рассмотрим наиболее распространенную форму $\boldsymbol{R}_{ij}$ и Φ_{ij}:

$$\boldsymbol{R}_{ij} = a_{ij}(\boldsymbol{U}_j - \boldsymbol{U}_i); \tag{9}$$

$$\Phi_{ij} = \varphi_{ij}(P_j - P_i) + \psi_{ij}(T_j - T_i). \tag{10}$$

Функции a_{ij}, φ_{ij}, ψ_{ij} имеют конкретный вид, зависящий от агрегатных и фазовых состояний i-го и j-го компонентов, размеров, формы и шероховатости поверхности частиц, механических и тепловых свойств компонентов. Чтобы выполнялись условия (8), функции a, φ, ψ должны удовлетворять соотношениям взаимности Онсагера [9]

$$a_{ij} = a_{ji}, \qquad \varphi_{ij} = \varphi_{ji}, \qquad \psi_{ij} = \psi_{ji}. \tag{11}$$

Суммарное количество движения и суммарная энергия, которые i-й компонент приобретает (или отдает), обмениваясь с остальными компонентами смеси, определяются уравнениями

$$\boldsymbol{R}_i = \sum_{j=1}^{N} \alpha_j \boldsymbol{R}_{ij}, \qquad \Phi_i = \sum_{j=1}^{N} \alpha_j \Phi_{ij}. \tag{12}$$

Рассмотрим одну из возможных функций a_{ij}, удовлетворяющих условиям (11), а именно

$$a_{ij} = a \rho_i \rho_j. \tag{13}$$

Подставив (13) в (9) и просуммировав по j в соответствии с (12), получим выражение для вектора $\boldsymbol{R}_i$:

$$\boldsymbol{R}_i = a\rho_i \Big(\sum_{j=1}^{N} \alpha_j \rho_j \boldsymbol{U}_j - \boldsymbol{U}_i \sum_{j=1}^{N} \alpha_j \rho_j \Big). \tag{14}$$

С помощью широко применяемых правил осреднения

$$\rho = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i \rho_i; \qquad (15)$$

$$\rho \boldsymbol{U} = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i \rho_i \boldsymbol{U}_i \qquad (16)$$

выражение (14) преобразуется к виду

$$\boldsymbol{R}_i = a\rho_i \rho(\boldsymbol{U} - \boldsymbol{U}_i). \qquad (17)$$

Скорость $\boldsymbol{U}$, определенная уравнением (16), называется среднемассовой или барицентрической.

Обратим внимание, что формы (14) и (17) эквивалентны. Но уравнение (14) определяет взаимодействие i-го компонента с МКС путем учета взаимодействия с каждым j-м компонентом, а выражение (17) — взаимодействие i-го компонента с ВСС, свойства которой определяются средними величинами ρ и $\boldsymbol{U}$. Таким образом, ВСС является участником обмена. Если присвоить ВСС индекс 0, то (17) примет вид

$$\boldsymbol{R}_{i0} = a\rho_i \rho_0(\boldsymbol{U}_0 - \boldsymbol{U}_i).$$

Легко показать, что этот вектор удовлетворяет условию (8) в виде

$$\boldsymbol{R}_{i0} = -\boldsymbol{R}_{0i}. \qquad (18)$$

По аналогии с $\boldsymbol{R}_{ij}$ рассмотрим интенсивность потока энергии (10) между компонентами i и j

$$\Phi_{ij} = \varphi(P_j - P_i) + \psi \rho_i \rho_j (T_j - T_i). \qquad (19)$$

Просуммировав по j в соответствии с (12), получим

$$\Phi_i = \varphi\Big(\sum_{j=1}^{N} \alpha_j P_j - P_i \sum_{j=1}^{N} \alpha_j\Big) + \psi \rho_i \Big(\sum_{j=1}^{N} \alpha_j \rho_j T_j - T_i \sum_{j=1}^{N} \alpha_j \rho_j\Big). \qquad (20)$$

Используя (1), (15) и правила осреднения

$$P = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i P_i; \qquad (21)$$

$$\rho T = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i \rho_i T_i, \qquad (22)$$

представим (20) в виде интенсивности обмена энергией между ВСС и i-м компонентом:

$$\Phi_i = \varphi(P - P_i) + \psi \rho_i \rho (T - T_i). \qquad (23)$$

Если параметрам ВСС присвоить индекс $j = 0$, то уравнение (23) примет вид

$$\Phi_{i0} = \varphi(P_0 - P_i) + \psi \rho_0 \rho_i (T_0 - T_i). \qquad (24)$$

Из соотношений (19), (20), (23), (24) видно, что условие (8) выполнено, в том числе и для $j = 0$:

$$\Phi_{i0} = -\Phi_{0i}. \qquad (25)$$

Сказанное означает, что если i-й компонент получает некоторый импульс или энергию, то ВСС такой же импульс или энергию ему отдает. Иными словами, законы сохранения сплошной среды должны содержать соответствующие члены, суммирующие все импульсы и энергии, отдаваемые ВСС компонентам.

Полученные выше результаты имеют принципиальное значение. Они показывают, что релаксационные потоки импульса и энергии в МКС можно рассматривать либо как сумму обменов между всеми парами компонентов, либо как обмен каждого компонента с ВСС, выражающей свойства МКС, т. е. всех компонентов.

При выбранной форме функций a_{ij}, φ_{ij}, ψ_{ij} вектор $\boldsymbol{R}_i$ и функция Φ_i таковы, что их сумма по всем $i = 1, 2, \ldots, N$ обращается в нуль:

$$\boldsymbol{R} = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i \boldsymbol{R}_i = 0, \qquad \Phi = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i \Phi_i = 0 \tag{26}$$

или, что то же самое,

$$\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} \alpha_i \alpha_j \boldsymbol{R}_{ij} = 0, \qquad \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} \alpha_i \alpha_j \Phi_{ij} = 0.$$

Ниже ограничимся анализом моделей, содержащих $\boldsymbol{R}_{ij}$ и Φ_{ij}, удовлетворяющие условиям (8), (11) и (26).

Сплошная среда смеси. Уравнения (2), (5)–(7) получены после перехода от микроуровня на макроуровень для i-го компонента. Но компоненты являются структурными элементами МКС. Иными словами, классические методы осреднения позволили перейти от структурной среды микроуровня к структурной среде мезоуровня.

Чтобы сделать следующий шаг и перейти от структурной МКС к ВСС, применяют, как правило (см. [1–7]), уравнения, с помощью которых по характеристикам компонентов определяются средние характеристики МКС. Это уравнения (15), (16), (21), (22), а также соотношения

$$\rho E = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i \rho_i E_i. \tag{27}$$

Осреднение удельной полной энергии ε_i требует внимательного рассмотрения. Дело в том, что $E = \varepsilon - \boldsymbol{U}\boldsymbol{U}/2$, $E_i = \varepsilon_i - \boldsymbol{U}_i\boldsymbol{U}_i/2$, и если подставить эти величины в (27), то получим

$$\rho\varepsilon = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i \rho_i (\varepsilon_i - H_i), \tag{28}$$

где

$$H_i = (\boldsymbol{U}_i\boldsymbol{U}_i - \boldsymbol{U}\boldsymbol{U})/2. \tag{29}$$

Величину H_i назовем неравновесной кинетической энергией i-го компонента. Если ввести неравновесную кинетическую энергию H

$$\rho H = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i \rho_i H_i, \tag{30}$$

то (28) примет вид

$$\rho(\varepsilon + H) = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i \rho_i \varepsilon_i. \tag{31}$$

МКС описывается системами законов сохранения и уравнениями состояния компонентов. Их количество равно числу компонентов N. Решив все эти системы, найдем для некоторого момента времени t величины ρ_i, P_i, $\boldsymbol{U}_i$, T_i, E_i, $\alpha_i, \ldots$ $(i = 1, 2, \ldots, N)$ как функции x_1, x_2, x_3. Затем осредним эти величины с помощью уравнений (15), (16), (21), (22), (27)–(31) и получим характеристики

$$\rho, \quad P, \quad \boldsymbol{U}, \quad E, \quad T, \quad \ldots . \tag{32}$$

Задачу, к которой мы пришли, можно сформулировать так: какой должна быть система законов сохранения ВСС, чтобы ее решение совпало с (32).

В классической сплошной среде макрохарактеристики вещества P, ρ, E, $\boldsymbol{U}$, T, S и др. получаются после осреднения характеристик большого количества микрочастиц. Правила осреднения подробно излагаются в монографиях [10–13] и выходят за рамки данной работы. Важно, что средние характеристики вещества (макровеличины) непрерывны в пространстве x_1, x_2, x_3, t и для них могут быть записаны законы сохранения, которые замыкаются уравнениями состояния вещества в виде зависимости между термодинамическими величинами. Известно, однако, что уравнение состояния описывает равновесные состояния вещества. В случае возникновения неравновесных состояний в законах сохранения в соответствии с [9] должны появляться дополнительные силы и потоки, описывающие релаксацию неравновесных состояний к равновесным. Законы сохранения для макровеличин сплошной среды без учета турбулентности, химических реакций, влияния полей (электромагнитных, гравитационных и др.) и теплопроводности, но с учетом действия тензорных сил, потоков энергии и обменных членов в правых частях уравнений имеют вид

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \rho \boldsymbol{U} = 0; \tag{33}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \boldsymbol{U}) + \frac{\partial}{\partial x_k}(\rho U_k \boldsymbol{U}) + \nabla P + \frac{\partial}{\partial x_k}(\boldsymbol{F}_k) = \boldsymbol{R}; \tag{34}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\varepsilon) + \nabla \boldsymbol{U}(P + \rho\varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_k}(\boldsymbol{F}_k \boldsymbol{U}) + \nabla \boldsymbol{Q} = \Phi. \tag{35}$$

Система (33)–(35) не замыкается уравнением состояния, поскольку функции ρ, P, $\boldsymbol{U}$, E, ε не связаны уравнением состояния, а являются осредненными характеристиками ВСС, определяемыми уравнениями (15), (16), (21), (22), (27)–(31).

Связь законов сохранения макро- и мезоуровней. Попытки перейти от мезоуровня описания МКС на макроуровень предпринимались неоднократно. Практически всегда (см. [2, 4, 5]) суммировались уравнения (2)–(4), с тем чтобы получились уравнения (33)–(35). Поступим наоборот, имея в виду, что характеристики сплошной среды введены уравнениями (15), (16), (21), (22), (27)–(31), а уравнения, которым они должны удовлетворять, нужно найти. При этом заранее не очевидно, хватит ли для этого возможностей, предусмотренных в (33)–(35).

Подставим ρ и $\rho\boldsymbol{U}$ из (15) и (16) в закон сохранения массы (33). В результате получим

$$\sum_{i=1}^{N} \Big(\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_i \rho_i) + \nabla \alpha_i \rho_i \boldsymbol{U}_i\Big) = 0. \tag{36}$$

Каждое слагаемое в (36) равно нулю, поскольку оно совпадает с законом сохранения массы i-го компонента (2).

Аналогично поступим с законом сохранения количества движения (34). Подставим в него соотношения (21) и (26), выражение (16) в виде

$$\rho U_k = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i \rho_i U_{ik}, \tag{37}$$

а также соотношение

$$\boldsymbol{F}_k = -\sum_{j=1}^{N} \alpha_i \boldsymbol{F}_{ik}, \tag{38}$$

полученное по правилам осреднения и с учетом (18). Тогда уравнение (34) примет вид

$$\sum_{i=1}^{N} \Big(\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_i \rho_i \boldsymbol{U}_i) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\alpha_i \rho_i U_{ik} \boldsymbol{U}) + \nabla \alpha_i P_i - \frac{\partial}{\partial x_k} (\alpha_i \boldsymbol{F}_{ik}) - \alpha_i \boldsymbol{R}_i \Big) = 0. \tag{39}$$

Условие совпадения каждого слагаемого в (39) с уравнением (6) имеет вид

$$\frac{\partial}{\partial x_k} (2\alpha_i \boldsymbol{F}_{ik} - \alpha_i \rho_i U_{ik} (\boldsymbol{U} - \boldsymbol{U}_i)) = 0.$$

После интегрирования приходим к выражению для компонентов силы F_i

$$\boldsymbol{F}_{ik} = \rho_i U_{ik} (\boldsymbol{U} - \boldsymbol{U}_i)/2. \tag{40}$$

Постоянная интегрирования определена из условия $\boldsymbol{F}_{ik} = 0$ при $\boldsymbol{U} = \boldsymbol{U}_i$.

Перейдем к рассмотрению уравнения энергии (35). Подставим в него величину Φ, удовлетворяющую уравнениям (21), (26), (28), (38), и величину $\boldsymbol{Q}$, выраженную через $\boldsymbol{Q}_i$ с учетом (25), а именно

$$\boldsymbol{Q} = -\sum_{i=1}^{N} \alpha_i \boldsymbol{Q}_i. \tag{41}$$

В результате получим закон сохранения энергии ВСС

$$\sum_{i=1}^{N} \Big(\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_i \rho_i (\varepsilon_i - H_i)) + \nabla (\alpha_i \boldsymbol{U} (P_i + \rho_i \varepsilon_i - \rho_i H_i)) - \\ - \frac{\partial}{\partial x_k} (\alpha_i \boldsymbol{F}_{ik} \boldsymbol{U}) - \nabla \alpha_i \boldsymbol{Q}_i - \alpha_i \Phi_i \Big) = 0. \tag{42}$$

Условие совпадения каждого слагаемого в (42) с уравнением энергии i-го компонента (7) имеет вид

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_i \rho_i H_i) + \nabla \alpha_i (P_i + \rho_i \varepsilon_i)(\boldsymbol{U}_i - \boldsymbol{U}) + \nabla \alpha_i \rho_i \boldsymbol{U} H_i + \\ + \frac{\partial}{\partial x_k} (\alpha_i \boldsymbol{F}_{ik} (\boldsymbol{U}_i + \boldsymbol{U})) + 2\nabla \alpha_i \boldsymbol{Q}_i = 0. \tag{43}$$

Будем считать, что поток энергии $\boldsymbol{Q}_i$ выражается через функции, характеризующие состояние i-го компонента, следующим образом:

$$\boldsymbol{Q}_i = (P_i + \rho_i \varepsilon_i)(\boldsymbol{U} - \boldsymbol{U}_i)/2. \tag{44}$$

В этом случае уравнение (43) принимает вид

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_i \rho_i H_i) + \nabla \alpha_i \rho_i H_i \boldsymbol{U} + \frac{\partial}{\partial x_k} (\alpha_i \boldsymbol{F}_{ik} (\boldsymbol{U}_i + \boldsymbol{U})) = 0. \tag{45}$$

Подставив в (45) выражение $\boldsymbol{F}_{ik}$ из (40) и учитывая соотношение (29), получим уравнение для неравновесной кинетической энергии H_i:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_i \rho_i H_i) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\alpha_i \rho_i H_i (U_k - U_{ik})) = 0. \tag{46}$$

Полнота модели. Широко применяемая для описания поведения i-го компонента МКС система уравнений (2)–(5) вместе с уравнением $\varepsilon_i = E_i + \boldsymbol{U}_i \cdot \boldsymbol{U}_i/2$ не является замкнутой, поскольку содержит 7 уравнений для 8 искомых функций (P_i, ρ_i, E_i, ε_i, U_{1i}, U_{2i}, U_{3i}, α_i). В отличие от классических законов сохранения сплошной среды в них добавляется объемная концентрация α_i. Незамкнутость системы уравнений (2)–(5) порождает большое количество частных моделей, в которых предполагается отсутствие неравновесности по давлению, температуре или скорости. Предположение о частичном равновесии МКС делает систему уравнений замкнутой, но при этом теряется общность и уменьшается область применимости модели. Выше показано, что при введении в уравнение i-го компонента силы F_i с помощью уравнения (40) и потока энергии $\boldsymbol{Q}_i$ с помощью уравнения (44) к системе уравнений (2), (6), (7) добавляется уравнение для неравновесной кинетической энергии (46) и выражение H_i через $\boldsymbol{U}_i$ и $\boldsymbol{U}$ из (29). Таким образом, новая система уравнений для i-го компонента содержит 9 уравнений для 9 искомых функций и, следовательно, является замкнутой.

Предложенные в данной работе сила F_i и поток энергии $\boldsymbol{Q}_i$ не равны нулю только в случае неравновесности по скорости $\boldsymbol{U}$. Они прямо пропорциональны разности между барицентрической скоростью $\boldsymbol{U}$ и индивидуальной скоростью i-го компонента $\boldsymbol{U}_i$. При наступлении равновесия по $\boldsymbol{U}$ величины F_i и $\boldsymbol{Q}_i$ обращаются в нули. Отметим одну особенность введенных параметров F_i и $\boldsymbol{Q}_i$. Они не содержат эмпирических функций или постоянных. Индивидуальные особенности каждого компонента (шероховатость поверхности, размер частиц, скорость звука и др.) по-прежнему должны учитываться функциями a, φ, ψ в выражениях $\boldsymbol{R}_i$ и Φ_i.

Выше было показано, что в случае использования осреднений (15) и (16) суммирование законов сохранения массы компонентов (2) приводит к закону сохранения массы ВСС (33). Просуммируем уравнение (6):

$$\frac{\partial}{\partial t}\sum_{i=1}^{N}\alpha_i\rho_i\boldsymbol{U}_i + \frac{\partial}{\partial x_k}\sum_{i=1}^{N}\alpha_i\rho_i U_{ik}\boldsymbol{U}_i + \nabla\sum_{i=1}^{N}\alpha_i P_i + \frac{\partial}{\partial x_k}\sum_{i=1}^{N}\alpha_i\boldsymbol{F}_{ik} = \sum_{i=1}^{N}\alpha_i\boldsymbol{R}_i. \qquad (47)$$

Преобразуем (47) с помощью (16), (21), (26) к виду

$$\frac{\partial}{\partial t}\,\rho\boldsymbol{U} + \frac{\partial}{\partial x_k}\sum_{i=1}^{N}\alpha_i\rho_i U_{ik}\boldsymbol{U}_i + \nabla P + \frac{\partial}{\partial x_k}\sum_{i=1}^{N}\alpha_i\boldsymbol{F}_{ik} = 0. \qquad (48)$$

Из уравнения (40) следует, что

$$\rho_i U_{ik}\boldsymbol{U}_i + \boldsymbol{F}_{ik} = \rho_i U_{ik}\boldsymbol{U} - \boldsymbol{F}_{ik}. \qquad (49)$$

Используем (37), (38) и (49) и преобразуем (48) к виду (34). Следовательно, суммирование по всем компонентам законов сохранения количества движения i-го компонента дает закон сохранения количества движения ВСС.

Проделаем аналогичное преобразование с уравнением энергии. Перед суммированием уравнения (7) по i преобразуем его с помощью следующего из (44) уравнения

$$\boldsymbol{U}_i(P_i + \rho_i\varepsilon_i) + \boldsymbol{Q}_i = \boldsymbol{U}(P_i + \rho_i\varepsilon_i) - \boldsymbol{Q}_i$$

к виду

$$\frac{\partial}{\partial t}\,(\alpha_i\rho_i\varepsilon_i) + \nabla(\alpha_i\boldsymbol{U}(P_i + \rho_i\varepsilon_i)) + \frac{\partial}{\partial x_k}\,(\alpha_i\boldsymbol{F}_{ik}\boldsymbol{U}_i) - \nabla\alpha_i\boldsymbol{Q}_i = \alpha_i\Phi_i.$$

После суммирования и применения уравнений перехода от сумм к макровеличинам (21), (26), (31) и (41) получим

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\varepsilon) + \nabla \boldsymbol{U}(P+\rho\varepsilon) + \sum_{i=1}^{N}\Big(\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_i\rho_i H_i) + \nabla(\alpha_i\rho_i H_i \boldsymbol{U}) + \\ + \frac{\partial}{\partial x_k}(\alpha_i \boldsymbol{F}_{ik}(\boldsymbol{U}_i+\boldsymbol{U})) - \frac{\partial}{\partial x_k}(\alpha_i \boldsymbol{F}_{ik}\boldsymbol{U})\Big) + \nabla \boldsymbol{Q} = 0.$$

Выражение, стоящее под знаком суммы, преобразуется с помощью (38) и (45) к виду (35). Таким образом, суммирование законов сохранения энергии компонентов приводит к закону сохранения энергии ВСС.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Рахматулин Х. А.** Основы газодинамики взаимопроникающих движений сжимаемых сред // Прикл. математика и механика. 1956. Т. 20, вып. 2. С. 184–195.
2. **Крайко А. Н., Нигматулин Р. И., Старков В. К., Стернин Л. Е.** Механика многофазных сред // Итоги науки и техники. Гидромеханика. М.: ВИНИТИ, 1973. Т. 6. С. 93–174.
3. **Кутателадзе С. С., Стырикович М. А.** Гидравлика газожидкостных систем. М.: Госэнергоиздат, 1958.
4. **Нигматулин Р. И.** Основы механики гетерогенных сред. М.: Наука, 1978.
5. **Нигматулин Р. И.** Динамика многофазных сред. Ч. 1, 2. М.: Наука, 1987.
6. **Куропатенко В. Ф.** Неустановившиеся течения многокомпонентных сред // Мат. моделирование. 1989. Т. 1, № 2. С. 118–136.
7. **Яненко Н. Н., Солоухин Р. И., Папырин А. Н., Фомин В. М.** Сверхзвуковые двухфазные течения в условиях скоростной неравновесности частиц. Новосибирск: Наука. Сиб. отд-ние, 1980.
8. **Куропатенко В. Ф.** Уравнения состояния в математических моделях механики и физики // Экстремальные состояния вещества: Сб. науч. тр. / АН СССР. ИВТАН, 1991. С. 3–38.
9. **Де Гроот С. Р.** Термодинамика необратимых процессов. М.: Гостехтеоретиздат, 1956.
10. **Гиршфельдер Д., Кертис Ч., Берд Р.** Молекулярная теория газов и жидкостей. М.: Изд-во иностр. лит., 1961.
11. **Цянь Сюэ-Сень.** Физическая механика. М.: Мир, 1965.
12. **Френкель Я. И.** Статистическая физика. М.; Л.: Изд-во АН СССР, 1948.
13. **Даниэльс Ф., Олберти Р.** Физическая химия. М.: Мир, 1978.

Поступила в редакцию 2/III 2004 г.