УДК 539.3

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ ДЕФОРМИРУЕМЫХ СРЕД

Б.Е. Победря, И.Л. Гузей (Москва)

Abstract.

The basic postulates of continuous medium mechanics are generalized on a case of a multicomponent medium. The integrated statements of postulates and differential corollaries from them are given.

§1. Постулаты МСС и дифференциальные следствия из них

В механике сплошной среды вводятся постулаты, справедливые для любого объёма V, содержащегося в этой сплошной среде, который ограничивается замкнутой поверхностью Σ [1,2].

Первый постулат называется законом сохранения масс:

$$\frac{d}{dt}\int_V \rho\, dV = 0. \tag{1}$$

Здесь $\rho(x_1, x_2, x_3, t)$ - плотность вещества.

Второй постулат – это закон изменения количества движения:

$$\frac{d}{dt}\int_V \rho \frac{d\vec{v}}{dt} dV = \int_V \rho \vec{F} dV + \int_\Sigma \vec{S}^{(n)} d\Sigma \tag{2}$$

Здесь $\vec{v}$ - вектор скорости, $\vec{F}$ - плотность массовых сил, $\vec{S}^{(n)}$ - поверхностная нагрузка, действующая на площадке с единичным вектором нормали $\vec{n}$:

$$\vec{S}^{(n)} = \vec{S}_i n_i, \quad \vec{S}_i = \sigma_{ij}\vec{e}_j \tag{3}$$

где σ_{ij} - компонента тензора напряжений. Мы будем рассматривать всюду малые деформации [2], так что эйлеровы координаты совпадают с лагранжевыми. Все события происходят в пространстве $R^1(0,t)\times R^3(x_1,x_2,x_3)$ [3]. В пространстве R^3 можно ввести радиус-вектор $\vec{r}$ [2]. Тогда постулат об изменении момента количества движения или кинетического момента можно записать в виде

$$\frac{d}{dt}\int_V \vec{r}\times\rho\frac{d\vec{v}}{dt} dV = \int_V \vec{r}\times\rho\vec{F}dV + \int_\Sigma \vec{r}\times\vec{S}^{(n)}d\Sigma \tag{4}$$

Если рассматриваются неизотермические процессы, то следует привлечь законы термодинамики.

Первый закон термодинамики (закон сохранения энергии) может быть сформулирован в виде

$$dE + dK = \delta Q + \delta A^{(e)}, \tag{5}$$

где E - внутренняя энергия среды, которая связана с плотностью внутренней энергии e соотношением

$$E = \int_V \rho e\, dV\,; \tag{6}$$

K - кинетическая энергия,

$$K = \frac{1}{2}\int_V \rho \vec{v} \cdot \vec{v}\, dV\,; \tag{7}$$

δQ - изменение внешнего притока тепла:

$$\delta Q \equiv dt\left[\int_V \rho q dV - \int_\Sigma q^{(n)} d\Sigma\right], \tag{8}$$

где q - массовый источник тепла, $q^{(n)}$ - приток тепла через поверхность с единичным вектором нормали $\vec{n} = n_i \vec{e}_i$:

$$q^{(n)} = q_i n_i\,; \tag{9}$$

$\delta A^{(e)}$ - изменение работы внешних сил

$$\delta A = dt\left[\int_V \rho \vec{F} \cdot \vec{v}\, dV - \int_\Sigma \vec{S}^{(n)} \cdot \vec{v}\, d\Sigma\right]. \tag{10}$$

Используя теорему живых сил

$$dK = \delta A^{(e)} + \delta A^{(i)}, \tag{11}$$

где $\delta A^{(i)}$ - изменение работы внутренних сил

$$\delta A^{(i)} \equiv dt \int_V \sigma_{ij} v_{ij} dV\,, \tag{12}$$

а v_{ij} - компоненты тензора скоростей деформации, равные

$$v_{ij} = \frac{1}{2}\left(v_{i,j} + v_{j,i}\right), \tag{13}$$

первый закон термодинамики (5) можно записать в виде

$$dE = \delta Q - \delta A^{(i)}\ . \tag{14}$$

Внутренняя энергия E и её плотность e являются функциями термодинамических параметров состояния, задание которых и определяет математическую модель среды.

Второй закон термодинамики

$$TdS = \delta Q + W^* dt \tag{15}$$

гарантирует существование ещё одной функции термодинамических параметров состояния – энтропии S или её плотности s:

$$S \equiv \int_V \rho S\, dV . \tag{16}$$

В формулировку второго закона термодинамики входит также функция рассеивания (диссипации) W^* или её плотность w^*:

$$W^* \equiv \int w^* dV . \tag{17}$$

При этом для обратимых сред $W^* = 0$, а для необратимых $W^* > 0$. При построении математической модели сплошной среды задают конкретное выражение функции рассеивания.

Первый закон термодинамики (5) или (14) может быть сформулирован в интегральном виде соответственно

$$\frac{d}{dt}\int_V \rho\left(e + \frac{\mathbf{v}\cdot\mathbf{v}}{2}\right) dV = \int_V \left[\rho q + \sum_{\alpha=1}^{m} \rho^{(\alpha)} \mathbf{F}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{v}^{(\alpha)}\right] dV + \int_\Sigma \left[\mathbf{S}^{(n)} \cdot \mathbf{v} - q^{(n)}\right] d\Sigma , \tag{18}$$

$$\frac{d}{dt}\int_V \rho e\, dV = \int_V \left[\rho q + \sum_{\alpha=1}^{m} \mathbf{F}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{j}^{(\alpha)} + \sigma_{ij} v_{ij}\right] dV - \int_\Sigma q^{(n)} d\Sigma . \tag{19}$$

Точно так же на основании (15) может быть дана интегральная формулировка второго закона термодинамики

$$\frac{d}{dt}\int_V \rho s\, dV = \int_V \frac{\rho q}{T} dV - \int_S \frac{q^{(n)}}{T} dS + \int_V \left[\frac{w^*}{T} - \frac{q_i T_{,i}}{T^2}\right] dV . \tag{20}$$

Можно дать дифференциальные следствия из интегральных формулировок основных постулатов МСС. Так из закона сохранения масс (1) следует уравнение неразрывности

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) = 0 . \tag{21}$$

Из закона об изменении количества движения (2) следуют уравнения движения сплошной среды в векторной форме

$$\rho \frac{d\vec{v}}{dt} = \rho \vec{F} + \vec{S}_{i,i} \tag{22}$$

или в компонентах

$$\rho \frac{dv_i}{dt} = \rho F_i + \sigma_{ji,j} \tag{23}$$

Из закона об изменении кинетического момента (4) следует симметричность тензора напряжений σ:

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ji} . \tag{24}$$

Дифференциальным следствием первого закона термодинамики является уравнение

$$\rho\frac{de}{dt}+\frac{\rho}{2}\frac{d(\vec{v}\cdot\vec{v})}{dt}=\sigma_{ij}\cdot v_{ij}+\rho\vec{F}\cdot\vec{v}+\rho q-q_{i,i} \tag{25}$$

из интегральной формы (18) и

$$\rho\frac{de}{dt}=\sigma_{ij}v_{ij}+\rho q-q_{i,i} \tag{26}$$

из интегральной формы (19).

Дифференциальным следствием второго закона термодинамики (20) является уравнение

$$\rho T\frac{ds}{dt}=\rho q-q_{i,i}+w^{*}. \tag{27}$$

Уравнение (27) называется уравнением притока тепла. Обычно полагают справедливым классический закон теплопроводности Фурье

$$q_i=-\Lambda_{ij}T_{,j}, \tag{28}$$

где $\underset{\sim}{\Lambda}$ - тензор теплопроводности. Для изотропной среды

$$\Lambda_{ij}=\Lambda\delta_{ij}. \tag{29}$$

Таким образом, для однородной изотропной среды уравнение притока тепла (27) имеет вид

$$\rho T\frac{ds}{dt}=\Lambda\Delta T+\rho q+w^{*}. \tag{30}$$

§2. Основные уравнения для многокомпонентной среды

Для многокомпонентной среды некоторые постулаты приходится изменить. В связи с этим изменяются и основные уравнения.

Пусть каждая частица сплошной среды содержит m подчастиц (компонентов). Каждый компонент имеет плотность $\rho^{(\alpha)}$, $\alpha=1,\ldots,m$. Суммарная плотность частицы вещества равна ρ:

$$\rho=\sum_{\alpha=1}^{m}\rho^{(\alpha)} \tag{1}$$

Скорость каждого компонента обозначим через $\vec{v}^{(\alpha)}$. Тогда скорость каждой частицы сплошной среды $\vec{v}$ можно представить как центр масс подчастиц:

$$\mathbf{v}=\sum_{\alpha=1}^{m}\frac{\rho^{(\alpha)}\mathbf{v}^{(\alpha)}}{\rho} \tag{2}$$

Определим диффузионный поток $\vec{j}^{(\alpha)}$ формулой [4]

$$\mathbf{j}^{(\alpha)}=\rho^{(\alpha)}\left(\mathbf{v}^{(\alpha)}-\mathbf{v}\right) \tag{3}$$

Из (1)-(3) следует, что

$$\sum_{\alpha=1}^{m} \mathbf{j}^{(\alpha)} = 0 \quad . \tag{4}$$

Введём величину массовой концентрации компонента α:

$$c^{(\alpha)} \equiv \rho^{(\alpha)} / \rho \quad . \tag{5}$$

Из (1) и (5) следует, что

$$\sum_{\alpha=1}^{m} c^{(\alpha)} = 1 \quad . \tag{6}$$

В литературе встречаются и другие характеристики, описывающие концентрацию вещества [5]. Например, объёмная концентрация

$$v^{(\alpha)} = V^{(\alpha)} / V \quad , \tag{7}$$

т. е. отношение объёма, занимаемого компонентом α, ко всему объёму V; молярный объём компонента

$$\omega^{(\alpha)} = V^{(\alpha)} / N^{(\alpha)} \quad , \tag{8}$$

где $N^{(\alpha)}$ - число частиц компонента α. Количество частиц, приходящееся на единицу объёма,

$$n^{(\alpha)} = N^{(\alpha)} / V \tag{9}$$

и т.п.

Иначе вводятся и диффузионные потоки. Например,

$$\mathbf{i}^{(\alpha)} = n^{(\alpha)} \mathbf{v}^{(\alpha)} \quad . \tag{10}$$

В отличие от (4) сумма этих потоков не равна нулю, но

$$\sum_{\alpha=1}^{m} \omega^{(\alpha)} \mathbf{i}^{(\alpha)} = 0 \quad . \tag{11}$$

В многокомпонентной среде могут происходить химические реакции со скоростями J_I, $I = 1,2,\ldots,N$. Пусть $v_{\alpha I}$ -коэффициенты, пропорциональные стехиометрическим коэффициентам $\alpha = 1,2,\ldots,m$. Тогда для каждого компонента будет изменяться и постулат (1.1), который для каждого компонента может быть записан в виде

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho^{(\alpha)} dV = \int_V R_\alpha dV . \tag{12}$$

Соответствующее уравнение неразрывности для компонента α имеет вид

$$\frac{\partial \rho^{(\alpha)}}{\partial t} + \operatorname{div}\left(\rho^{(\alpha)} \mathbf{v}^{(\alpha)}\right) = \sum_{I=1}^{N} v_{\alpha I} J_I \equiv R_\alpha \quad , \tag{13}$$

где

$$\frac{\partial \rho^{(\alpha)}}{\partial t} + \operatorname{div}\left(\rho^{(\alpha)} \mathbf{v}^{(\alpha)}\right) = \sum_{I=1}^{N} v_{\alpha I} J_I \equiv R_\alpha \quad . \tag{14}$$

Просуммировав уравнения (13) по всем компонентам, получим на основании (1) и (2) уравнение неразрывности (1.21) для всей частицы. При этом очевидно

$$\sum_{\alpha=1}^{m} R_\alpha = 0 \quad . \tag{15}$$

Уравнения (13) запишем несколько в другом виде. Для этого добавим в левую часть (13) и вычтем из неё выражение $\frac{\partial \rho^{(\alpha)}}{\partial t} + \operatorname{div}\left(\rho^{(\alpha)} \mathbf{v}^{(\alpha)}\right) = \sum_{I=1}^{N} \nu_{\alpha I} J_I \equiv R_\alpha$, а также добавим нулевое слагаемое

$$-\rho^{(\alpha)}\left[\frac{1}{\rho}\frac{d\rho}{dt} + \operatorname{div}\vec{v}\right], \tag{16}$$

тогда имеем

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial \rho^{(\alpha)}}{\partial t} + \operatorname{div}\left(\rho^{(\alpha)}\vec{v}^{(\alpha)}\right) = \\
&= \frac{\partial \rho^{(\alpha)}}{\partial t} + \operatorname{div}\left(\rho^{(\alpha)}\vec{v}^{(\alpha)} + \rho^{(\alpha)}\vec{v} - \rho^{(\alpha)}\vec{v}\right) - \rho^{(\alpha)}\left[\frac{1}{\rho}\frac{d\rho}{dt}\operatorname{div}\vec{v}\right] = \\
&= \frac{\partial \rho^{(\alpha)}}{\partial t} + \operatorname{div}\left[\rho^{(\alpha)}\left(\vec{v}^{(\alpha)} - \vec{v}\right)\right] + \rho^{(\alpha)}_{,i} v_i + \rho^{(\alpha)} v_{i,i} - \rho^{(\alpha)} v_{i,i} - \frac{\rho^{(\alpha)}}{\rho}\frac{d\rho}{dt} - \rho^{(\alpha)} v_{i,i} = \\
&= \frac{d\rho^{(\alpha)}}{dt} + \operatorname{div}\vec{j}^{(\alpha)} - \frac{\rho^{(\alpha)}}{\rho}\frac{d\rho}{dt} = \\
&= \frac{d\rho^{(\alpha)}}{dt} - \frac{d}{dt}\left(\rho c^{(\alpha)}\right).
\end{aligned} \tag{17}$$

Поэтому вместо уравнения (13) получим эквивалентное ему

$$\rho\frac{dc^{(\alpha)}}{dt} + \operatorname{div}\mathbf{j}^{(\alpha)} = R_\alpha \quad . \tag{18}$$

Заметим, что уравнения, аналогичные (13), (18), для других концентраций имеют вид:

$$\frac{\partial n^{(\alpha)}}{\partial t} + \operatorname{div}\left(n^{(\alpha)}\mathbf{v}^{(\alpha)}\right) = \frac{R_\alpha}{M_0} \quad , \tag{19}$$

$$\frac{\partial \nu^{(\alpha)}}{\partial t} + \operatorname{div}\left(\omega^{(\alpha)}\mathbf{i}^{(\alpha)}\right) = \frac{V_0 R_\alpha}{M_0} \quad , \tag{20}$$

где V_0 - молярный объём, M_0 - средняя масса грамм-молекулы вещества.

Определяющие соотношения процесса диффузии задаются первым законом Фика [6], как связи между диффузионными потоками $\left(\mathbf{i}^{(\alpha)}, \omega^{(\alpha)}\mathbf{i}^{(\alpha)}, \mathbf{j}^{(\alpha)}\right)$ и градиентами соответствующих концентраций вещества данного типа $\left(n^{(\alpha)}, \nu^{(\alpha)}, c^{(\alpha)}\right)$. Эти определяющие соотношения связывают $(m-1)$ независимых векторов диффузионных потоков с $(m-1)$ градиентами независимых концентраций.

Если обозначить через $\vec{F}^{(\alpha)}$-массовые силы, действующие на каждый компонент композита, то суммарные массовые силы $\vec{F}$ естественно представить в виде

$$\rho\vec{F} = \sum_{\alpha=1}^{m} \rho^{(\alpha)}\vec{F}^{(\alpha)}. \tag{21}$$

Мощность этих сил может быть в соответствии с (3) представлена следующим образом

$$\sum_{\alpha=1}^{m} \rho^{(\alpha)}\mathbf{F}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{v}^{(\alpha)} = \sum_{\alpha=1}^{m} \mathbf{F}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{j}^{(\alpha)} + \rho\mathbf{F} \cdot \mathbf{v} \quad . \tag{22}$$

Выражение мощности фигурирует только в постулате, представляющем собой закон сохранения энергии (первый закон термодинамики). Поэтому из пяти рассмотренных в предыдущем параграфе постулатов (1.1), (1.2), (1.4), (1.18) или (1.19) и (1.20), изменениям для многокомпонентной среды кроме постулата (1.1) может подвергнуться только постулат (1.18) или (1.19).

Запишем вместо (1.18) для многокомпонентной среды

$$\frac{d}{dt}\int_V \rho\left(e + \frac{\mathbf{v}\cdot\mathbf{v}}{2}\right)dV = \int_V \left[\rho q + \sum_{\alpha=1}^{m} \rho^{(\alpha)}\mathbf{F}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{v}^{(\alpha)}\right]dV + \int_\Sigma \left[\mathbf{S}^{(n)} \cdot \mathbf{v} - q^{(n)}\right]d\Sigma \ , \tag{23}$$

а вместо (1.19) согласно (1.11) и (22)

$$\frac{d}{dt}\int_V \rho\left(e + \frac{\mathbf{v}\cdot\mathbf{v}}{2}\right)dV = \int_V \left[\rho q + \sum_{\alpha=1}^{m} \rho^{(\alpha)}\mathbf{F}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{v}^{(\alpha)}\right]dV + \int_\Sigma \left[\mathbf{S}^{(n)} \cdot \mathbf{v} - q^{(n)}\right]d\Sigma \tag{24}$$

Тогда дифференциальным следствием (23) будет уравнение

$$\rho\frac{de}{dt} + \frac{\rho}{2}\frac{d(\mathbf{v}\cdot\mathbf{v})}{dt} = \sum_{\alpha=1}^{m} \rho^{(\alpha)}\mathbf{F}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{v}^{(\alpha)} + \sigma_{ij}v_{ij} + \mathbf{S}_{i,j} \cdot \mathbf{v} + \rho q - q_{i,i} \quad , \tag{25}$$

а дифференциальным следствием (24) – уравнение

$$\rho\frac{de}{dt} = \sigma_{ij}v_{ij} + \sum_{\alpha=1}^{m} \mathbf{F}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{j}^{(\alpha)} + \rho q - q_{i,i} \quad . \tag{26}$$

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (96-01-0084), а также Федеральной целевой программой "Интеграция" (проект №426).

Библиографический список

1. Ильюшин А.А. Механика сплошной среды. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1990.
2. Победря Б.Е. Численные методы в теории упругости. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1985.
3. Победря Б.Е. Лекции по тензорному анализу. - М.: Изд-во Моск. ун-та, 1986. 264с.
4. Победря Б.Е., Гузей И.Л. Моделирование процессов обработки композиционных материалов. // МКМ, 1977. Т. 33. №1. С.13-23.
5. Де Грот С., Мазур П. Неравновесная термодинамика. М.: Мир, 1964.
6. Соколовская Е.М., Гузей Л.С. Металлохимия. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1986.