



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 75 за 2015 г.



ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

Балашов В.А., Савенков Е.Б.

Квазигидродинамическая
система уравнений для
описания течений
многофазной жидкости с
учетом поверхностных
эффектов

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Балашов В.А., Савенков Е.Б. Квазигидродинамическая система уравнений для описания течений многофазной жидкости с учетом поверхностных эффектов // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2015. № 75. 37 с.
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2015-75>

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
ОРДЕНА ЛЕНИНА
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М. В. КЕЛДЫША

В.А. Балашов, Е.Б. Савенков

**Квазигидродинамическая система уравнений
для описания течений многофазной жидкости
с учетом поверхностных эффектов**

Москва, 2015

В.А. Балашов, Е.Б. Савенков, Квазигидродинамическая система уравнений для описания течений многофазной жидкости с учетом поверхностных эффектов

Аннотация

Данная работа посвящена построению квазигидродинамической (КГиД) системы уравнений для описания течений вязкой сжимаемой теплопроводной многофазной многокомпонентной жидкости с учетом поверхностных эффектов. Способ получения системы обобщает феноменологический вывод однофазной КГиД системы, описанный в литературе, и вывод многофазной многокомпонентной модели течения с учетом поверхностных эффектов на основе концепции микросил и микронапряжений. Основу вывода составляет процедура Колмана–Нолла.

Ключевые слова: квазигидродинамическая система уравнений, многофазная гидродинамика, баланс микросил

V.A. Balashov, E.B. Savenkov, Quasihydrodynamic equations for diffuse interface type multiphase flow model with surface effects.

Abstract

In this paper we derive quasihydrodynamic (QHD) equations for compressible viscous nonisothermal multiphase flow with surface tension effects. The derivation generalizes phenomenological derivation of single phase single component QHD system published before and derivation of multiphase multicomponent model based on microforce concept. The derivation is based on Coleman–Noll procedure.

Key words and phrases: quasihydrodynamic equations, multiphase flows, microforce balance

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 14-11-00549).

1 Введение

Целью настоящей работы является построение математической модели для моделирования течений многофазной многокомпонентной жидкости с учетом поверхностных свойств фаз и фазовых переходов. Рассматриваемый тип моделей предполагает явное разрешение в пространстве межфазных границ и учет физических эффектов, связанных с их присутствием (учет сил поверхностного натяжения, смачиваемости, эффектов разделения фаз и т.д.).

Среди множества используемых в настоящее время вычислительных подходов для моделирования движения многофазной жидкости с прямым разрешением контактных границ известно два подхода для физико-математической формализации описания процессов, происходящих на границе раздела жидкостей (например, двух фаз с одним компонентным составом, но в разных агрегатных состояниях). Эти подходы носят названия моделей «четкой границы» («sharp interface») и «диффузной границы» («diffuse interface»). В рамках каждого из подходов в настоящее время предложен целый ряд моделей для описания течений многофазной жидкости, которые отличаются от других моделей своего класса скорее техническими деталями (как то: конкретным видом тех или иных определяющих соотношений, техническими особенностями способа описания границы раздела фаз и т.д.).

Модель «четкой границы» предполагает, что граница раздела фаз является математической поверхностью (геометрическим объектом нулевой «толщины»). Значения описывающих течение параметров, отнесенных к различным сторонам границы раздела (рис. 1a), могут иметь разрыв и связаны между собой дополнительными условиями, по сути и определяющими модель.

Модели типа «диффузной границы» предполагают, что фазы разделены тонким слоем конечной ширины, в пределах которого действуют силы межфазного взаимодействия, определяющие динамику контактной границы (рис. 1b). Ширина «границы» определяется действующими в жидкости силами межмолекулярного притяжения и отталкивания.

Отметим, что для многих моделей типа «диффузной границы» показано, что в пределе исчезающе малой толщины переходного слоя они вырождаются в классические модели «четкой границы». При использовании моделей «четкой границы» в ряде вычислительных алгоритмов «размазывание» границы между фазами также происходит, однако является лишь удобным вычислительным приемом или дефектом разностной схемы, связанным с ее диссипативными свойствами. В моделях типа «диффузной границы» конечная ширина границы является физическим, а не численным эффектом.

В данной работе в рамках модели типа «диффузной границы» феноменологически выводятся уравнения движения многофазной многокомпонентной

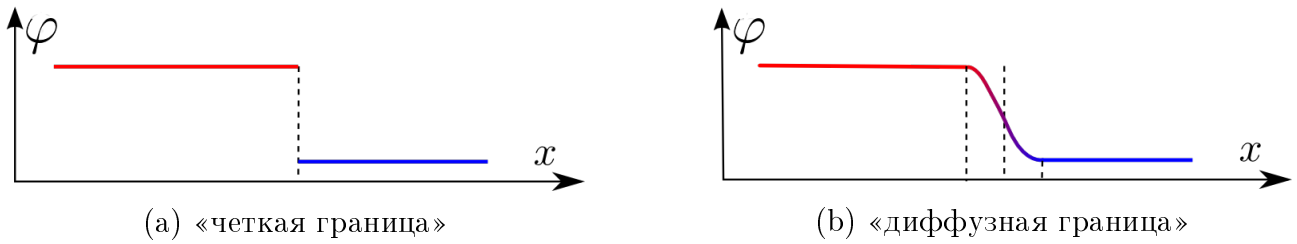


Рис. 1: Представление межфазной границы в моделях «четкой границы» и «диффузной границы». Параметр $\varphi(x)$ описывает, например, концентрацию одной из фаз в пространстве.

жидкости в рамках квазигидродинамического подхода с использованием концепции микросил и микронапряжений. В основе вывода системы уравнений лежат две ключевые идеи:

- фазовый состав (микроструктура) жидкости в области пространства описывается заданным в области непрерывным полем «параметра порядка». В качестве последнего выступают плотность жидкости и/или концентрации образующих его фаз. Следуя работам [1, 2], предполагается, что в жидкости действует набор микросил и микронапряжений, которые отвечают за эволюцию параметров порядка;
- выражения для микросил, микронапряжений и дополнительных квазигидродинамических слагаемых выводятся на основании требования выполнения второго закона термодинамики. Таким образом, безотносительно конкретной содержательной интерпретации микросил и микронапряжений, математическая модель не противоречит основным физическим законам (сохранения массы, импульса, энергии и момента импульса) и положениям феноменологической термодинамики.

Вывод модели в целом повторяет вывод, представленный в [1, 2], с тем отличием, что, в соответствии с КГиД подходом, плотность потока массы не совпадает с импульсом единицы объема среды.

С технической точки зрения настоящая работа является комбинацией двух подходов, а именно:

- детально изложенного в [2] способа получения уравнений многофазной гидродинамики с учетом поверхностных эффектов, основанного на концепции микросил и микронапряжений, и применении процедуры Колмана–Нолла [3];
- феноменологического вывода квазигидродинамической системы уравнений, предложенного Ю.В. Шеретовым и изложенного в [4].

2 Основные идеи концепции «микросил»

В некоторых задачах возникает необходимость описания на макроскопическом уровне процессов, связанных с эволюцией микроструктуры среды. В контексте настоящей работы примером таких процессов являются разделение фаз в смеси жидкостей с различными свойствами или, наоборот, слияние капель одной фазы в более крупные. Чтобы описывать микроструктуру среды на макроуровне, часто вводят скалярную функцию, называемую «параметром порядка» или «фазовым полем».

Например, в случае описания однокомпонентной жидкости с фазовыми переходами («жидкость–пар») в качестве параметра порядка может выступать плотность среды, а для двухкомпонентных несмешивающихся двухфазных сред (например, смесь «вода–масло») — объемная или массовая концентрация одной из фаз.

Для создания математической модели, описывающей подобные процессы, в настоящей работе используется подход, предложенный Гуртиным [1, 5, 6]. Этот подход основан на том соображении, что фундаментальные физические законы, определяющие эволюцию энергии жидкости, должны учитывать работу, связанную с каждым кинематическим процессом (который в нашем случае связан с изменением параметра порядка). Таким образом, весьма правдоподобно наличие некоторых «микросил», чья работа сопровождает изменения параметра порядка (по сути, микроструктуры среды).

В полной системе, описывающей динамику процесса в рамках моделей подобного типа, обычно можно выделить две связанные группы уравнений: первая описывает макроскопическую динамику среды и соответствующих полей, вторая — изменение параметра порядка. Так, например, в гидродинамике многофазной жидкости эволюция формы капли одной жидкости внутри другой и ее макроскопическое движение описываются уравнениями Навье–Стокса, в которые добавляются специальные члены, описывающие силы поверхностного натяжения, и уравнение, описывающее эволюцию распределения фаз и компонентов в пространстве и времени.

Более детально формализм математических моделей с использованием концепции микросил и микронапряжений и его приложения для построения математических моделей в различных областях физики описаны в работах [1, 2, 5, 6, 7].

Приведем основные уравнения систем микросил и микронапряжений, используемых в настоящей работе. Будем считать, что в среде действуют:

- (векторное) поле внутренних микронапряжений ξ ;
- (скалярное) поле внутренних микросил π ;
- (скалярное) поле внешних микросил γ .

Отдельно отметим, что здесь «микросилы» используются в широком смысле и, вообще говоря, не имеют никакого отношения к классическому понятию «сила» (подобно обобщенным термодинамическим силам).

Внутренние микросилы описывают силы, возникающие от взаимодействия «элементарных» частиц, составляющих среду. Внешние микросилы описывают внешнее воздействие, играющее роль только на микроуровне, но в масштабах задачи («макроуровень») не оказывающее никакого влияния. Микронапряжения описывают воздействие на микроструктуру через поверхность жидкого объема со стороны групп «элементарных» частиц окружающего вещества [1].

Для указанной системы микросил и микронапряжений *постулируется* выполнение следующих соотношений, справедливых для произвольного материального объема $V = V(t)$:

- уравнение баланса микросил, которое в интегральном виде имеет вид:

$$\int_{\partial V(t)} \boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{n} d\sigma + \int_{V(t)} \pi dV + \int_{V(t)} \gamma dV = 0,$$

и, как следствие, в дифференциальном:

$$\operatorname{div} \boldsymbol{\xi} + \pi + \gamma = 0.$$

Здесь \mathbf{n} — внешняя нормаль к границе ∂V области V ;

- выражение для мощности, т.е. работы в единицу времени, микронапряжений при изменении параметра порядка φ :

$$\int_{\partial V(t)} \frac{d\varphi}{dt} \boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{n} d\sigma$$

и мощности внутренних и внешних микросил:

$$\int_{V(t)} f \frac{d\varphi}{dt} dV, \quad f = \pi, \gamma.$$

Здесь и далее $d(\cdot)/dt$ — полная (субстанциональная, лагранжева, материальная) производная по времени.

По сути, считая φ «кинематической» переменной, последние соотношения выражают тот факт, что

$$[\text{мощность}] = [\text{скорость изменения } \varphi] \times \left[\begin{array}{c} \text{«сила», вызывающая} \\ \text{изменение } \varphi \end{array} \right]$$

или, эквивалентно,

$$[\text{работа}] = [\text{изменение } \varphi] \times \left[\begin{array}{c} \text{«сила», вызывающая} \\ \text{изменение } \varphi \end{array} \right],$$

причем «сила» понимается в широком смысле.

Отсюда видно, что поскольку фазовое поле выбрано скалярным, то и соответствующая микросила должна быть скалярной, а не векторной величиной.

Выражение для мощности микросил и микронапряжений имеет вид:

$$W = \int_{\partial V(t)} \frac{d\varphi}{dt} \boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{n} d\sigma + \int_{V(t)} \frac{d\varphi}{dt} \gamma dV,$$

причем считается, что соответствующая работа совершается *над объектом* V его окружением. Отметим, что в этом выражении не присутствуют внутренние микросилы. Более подробное изложение этого вопроса представлено в [1, 6];

- диссипативное неравенство, содержащее мощность микросил и микронапряжений. В том случае, если в среде не происходят никакие процессы, кроме как связанные с наличием микросил и микронапряжений, это неравенство имеет вид:

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \Psi \rho dV \leq \int_{\partial V(t)} \frac{d\varphi}{dt} \boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{n} d\sigma + \int_{V(t)} \frac{d\varphi}{dt} \gamma dV,$$

где Ψ — массовая плотность свободной энергии Гельмгольца. Для более сложных процессов, в частности, рассматриваемых в настоящей работе, в правой части последнего неравенства должны присутствовать слагаемые, отвечающие за работу других сил, действующих в системе (внешние силы, напряжения в жидкости и т.д.).

Приведенные выше уравнения определяют основные балансовые законы для микросил и микронапряжений, но не определяют вид зависимостей этих величин от параметров, описывающих среду.

3 Поток массы и массовая скорость

В соответствии с квазигидродинамическим подходом, будем полагать, что плотность потока массы \mathbf{j}_m не равна среднему импульсу единицы объема $\rho\mathbf{u}$:

$$\rho\mathbf{u} - \mathbf{j}_m =: \rho\mathbf{w} \neq 0.$$

Последнее выражение следует считать определением вектора \mathbf{w} . Конкретный вид определяющего соотношения для \mathbf{w} как функции физических полей, описывающих течение (плотности, скорости, давления и др.), будет получен ниже. Таким образом, для вектора плотности потока массы имеем:

$$\mathbf{j}_m = \rho(\mathbf{u} - \mathbf{w}). \quad (1)$$

Величину

$$\mathbf{u}_m := \frac{\mathbf{j}_m}{\rho} = \mathbf{u} - \mathbf{w} \quad (2)$$

будем называть «массовой скоростью».

В дальнейшем будем считать, что жидкая частица движется вдоль интегральной линии дифференциального уравнения

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \frac{\mathbf{j}_m}{\rho}, \quad \mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0.$$

Тогда формула дифференцирования по времени интеграла функции $\phi = \phi(\mathbf{x}, t)$ по жидкому объему примет вид:

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \phi dV = \int_{V(t)} \left[\frac{\partial \phi}{\partial t} + \operatorname{div} \left(\frac{\mathbf{j}_m}{\rho} \phi \right) \right] dV \quad (3)$$

для скалярных полей и

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \boldsymbol{\phi} dV = \int_{V(t)} \left[\frac{\partial \boldsymbol{\phi}}{\partial t} + \operatorname{div} \left(\frac{\mathbf{j}_m}{\rho} \otimes \boldsymbol{\phi} \right) \right] dV \quad (4)$$

для векторных.

В соответствии с вышесказанным, выражение для полной производной по времени имеет вид:

$$\frac{d}{dt}(\cdot) = \frac{\partial}{\partial t}(\cdot) + \frac{\mathbf{j}_m}{\rho} \cdot \nabla(\cdot) \equiv \frac{\partial}{\partial t}(\cdot) + (\mathbf{u} - \mathbf{w}) \cdot \nabla(\cdot) \equiv \frac{\partial}{\partial t}(\cdot) + \mathbf{u}_m \cdot \nabla(\cdot). \quad (5)$$

4 Модель компонентного состава

Будем считать, что жидкость состоит из N компонентов, причем в произвольном физически бесконечно малом объеме могут присутствовать все из них. Пусть в объеме пространства dV содержится жидкость массы dm , причем отдельные компоненты занимают объем dV_α и имеют массу dm_α , $\alpha = \overline{1, N}$:

$$dm = \sum_{\alpha=1}^N dm_\alpha.$$

Плотность жидкости и («натуральную») плотность составляющих ее компонентов определим как:

$$\rho = \frac{dm}{dV}, \quad \hat{\rho}_\alpha = \frac{dm_\alpha}{dV_\alpha}, \quad \alpha = \overline{1, N},$$

при этом выполняется соотношение:

$$\rho dV = \sum_{\alpha=1}^N \hat{\rho}_\alpha dV_\alpha.$$

Введем также плотность компонента, отнесенную к объему dV жидкости в целом:

$$\rho_\alpha = \frac{dm_\alpha}{dV} = \frac{dm_\alpha}{dV_\alpha} \cdot \frac{dV_\alpha}{dV}.$$

Тогда

$$\rho = \sum_{\alpha=1}^N \rho_\alpha, \quad \rho_\alpha = \hat{\rho}_\alpha \frac{dV_\alpha}{dV}.$$

Величину

$$C_\alpha = \frac{\rho_\alpha}{\rho} \tag{6}$$

будем называть массовой концентрацией (массовой долей) компонента α . Тогда

$$\rho_\alpha = C_\alpha \rho$$

и

$$\sum_{i=1}^N C_\alpha = 1. \tag{7}$$

Отсюда для объемной концентрации компонента справедливо выражение:

$$C_\alpha^v = \frac{dV_\alpha}{dV} = \frac{dm_\alpha}{dV} \bigg/ \frac{dm_\alpha}{dV_\alpha} = \frac{\rho_\alpha}{\hat{\rho}_\alpha}, \quad \alpha = \overline{1, N}.$$

5 Законы сохранения в интегральной форме

Пусть для произвольного подвижного жидкого объема $V = V(t)$ выполняются классические законы сохранения массы, импульса и энергии, которые имеют приведенный ниже вид.

Законы сохранения массы компонент

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \rho_\alpha dV = \int_{\partial V(t)} -\mathbf{h}_\alpha \cdot \mathbf{n} d\sigma + \int_{V(t)} m_\alpha dV, \quad \alpha = \overline{1, N}, \quad (8)$$

где \mathbf{h}_α и m_α — вектор плотности потока массы компонента α через границу *жидкого объема* и объемная плотность источников массы компонента α , соответственно.

Закон сохранения массы

Суммируя N уравнений (8), получим:

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \rho dV = \int_{\partial V(t)} -\mathbf{h} \cdot \mathbf{n} d\sigma + \int_{V(t)} m d\sigma,$$

где

$$\mathbf{h} = \sum_{\alpha=1}^N \mathbf{h}_\alpha, \quad m = \sum_{\alpha=1}^N m_\alpha.$$

При отсутствии *внешних* потоков и источников массы должно выполняться:

$$\mathbf{h} = 0, \quad m = 0. \quad (9)$$

Тогда закон сохранения массы примет вид:

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \rho dV = 0. \quad (10)$$

Его можно использовать в качестве замены одного из уравнений (8).

Закон сохранения импульса

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \rho \mathbf{u} dV = \int_{\partial V(t)} \mathbf{p}^{(n)} d\sigma + \int_{V(t)} \rho \mathbf{f} dV, \quad (11)$$

где $\mathbf{p}^{(n)}$ — сила, действующая на границе $\partial V(t)$, \mathbf{f} — вектор массовой плотности внешних сил, \mathbf{u} — скорость жидкости.

Баланс микросил

Будем считать, что в жидкости действуют две системы микросил. Первая из них связана с изменением массовых концентраций компонент и призвана описывать такие эффекты, как перемешивание и разделение компонент жидкости и прочие эффекты, связанные с «кинематикой» концентраций C_α . Соответствующие микронапряжения, внутренние и внешние микросилы будем обозначать как:

$$C_\alpha \longleftrightarrow \{\boldsymbol{\xi}_\alpha, \pi_\alpha, \gamma_\alpha\}, \quad \alpha = \overline{1, N}.$$

Соответствующая система балансовых уравнений имеет вид:

$$\int_{\partial V(t)} \boldsymbol{\xi}_\alpha \cdot \mathbf{n} d\sigma + \int_{V(t)} \pi_\alpha dV + \int_{V(t)} \gamma_\alpha dV = 0, \quad \alpha = \overline{1, N}, \quad (12)$$

где $\boldsymbol{\xi}_\alpha$ — поле микронапряжений (векторное), π_α — поле внутренних микросил (скалярное), γ_α — поле внешних микросил (скалярное), $\alpha = \overline{1, N}$.

Вторая система микросил связана с изменением плотности жидкости и призвана описывать такие эффекты, как фазовые переходы (которые могут происходить и в том случае, когда компонент всего один и его концентрация всегда равна единице):

$$\rho \longleftrightarrow \{\boldsymbol{\xi}, \pi, \gamma\}. \quad (13)$$

Соответствующее балансовое соотношение имеет вид:

$$\int_{\partial V(t)} \boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{n} d\sigma + \int_{V(t)} \pi dV + \int_{V(t)} \gamma dV = 0, \quad (14)$$

где $\boldsymbol{\xi}$ — поле микронапряжений (векторное), π — поле внутренних микросил (скалярное), γ — поле внешних микросил (скалярное).

Закон сохранения момента импульса

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \mathbf{x} \times (\rho \mathbf{u}) dV = \int_{V(t)} \mathbf{x} \times (\rho \mathbf{f}) dV + \int_{\partial V(t)} \mathbf{x} \times \mathbf{p}^{(n)} d\sigma. \quad (15)$$

Второй закон термодинамики

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \rho s dV + \int_{\partial V(t)} \frac{\mathbf{q}}{T} \cdot \mathbf{n} d\sigma - \int_{V(t)} \frac{\rho r}{T} dV \geq 0. \quad (16)$$

Закон сохранения энергии

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} \int_{V(t)} \rho \left(\varepsilon + \frac{\mathbf{u}^2}{2} \right) dV &= [\text{Скорость изменения энергии}] \\
 &+ \int_{V(t)} \mathbf{j}_m \cdot \mathbf{f} dV \quad [\text{Мощность внешних сил}] \\
 &+ \int_{\partial V(t)} \mathbf{a} \cdot \mathbf{n} d\sigma \quad [\text{Мощность внутренних сил}] \\
 &- \int_{\partial V(t)} \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} d\sigma \quad [\text{Тепловой поток}] \\
 &- \int_{\partial V(t)} \left(\sum_{\alpha=1}^{N-1} \mu_\alpha \mathbf{h}_\alpha \right) \cdot \mathbf{n} d\sigma \quad [\text{Приток энергии за счет притока вещества}] \\
 &+ \int_{V(t)} \sum_{\alpha=1}^{N-1} m_\alpha \mu_\alpha dV \quad [\text{Приток энергии за счет объемных источников массы компонентов}] \\
 &+ \sum_{\alpha=1}^{N-1} \left(\int_{\partial V(t)} \frac{dC_\alpha}{dt} \boldsymbol{\xi}_\alpha \cdot \mathbf{n} d\sigma + \int_{V(t)} \frac{dC_\alpha}{dt} \gamma_\alpha dV \right) \quad [\text{Мощность изменения параметра порядка } \varphi_\alpha \equiv C_\alpha, \alpha = 1, N-1] \\
 &+ \int_{\partial V(t)} \frac{d\rho}{dt} \boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{n} d\sigma + \int_{V(t)} \frac{d\rho}{dt} \gamma dV \quad [\text{Мощность изменения параметра порядка } \varphi_N \equiv \rho] \\
 &+ \int_{V(t)} r \rho dV. \quad [\text{Внешний источник энергии}]
 \end{aligned} \tag{17}$$

Здесь ε — массовая плотность внутренней энергии жидкости, \mathbf{q} — вектор плотности потока тепла, \mathbf{a} — вектор плотности потока энергии, связанный с работой внутренних напряжений, μ_α — обобщенный химический потенциал, r — массовая плотность внешних источников энергии.

Выражения в последних трех строках уравнения закона сохранения энергии описывают скорость изменения энергии за счет работы микронапряжений и внешних микросил в единицу времени.

6 Законы сохранения в дифференциальной форме

В этом разделе приведены дифференциальные законы сохранения, соответствующие сформулированным ранее интегральным законам.

Сначала рассматриваются законы сохранения в консервативной форме, которые представляют собой «основную» систему уравнений. Далее рассматриваются законы сохранения в лагранжевой форме. Они потребуются в дальнейшем при применении процедуры Колмана–Нолла.

6.1 Законы сохранения в консервативной форме

Используя формулы дифференцирования интеграла по подвижному объему (3), (4) и формулу Гаусса–Остроградского, можно получить приведенные ранее законы сохранения в дифференциальной форме.

Закон сохранения массы компонентов

Закон сохранения массы компонента α , $\alpha = \overline{1, N}$ имеет вид:

$$\frac{\partial \rho_\alpha}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{u}_m \rho_\alpha + \mathbf{h}_\alpha) = m_\alpha, \quad \alpha = \overline{1, N},$$

или, эквивалентно,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho C_\alpha) + \operatorname{div}(\mathbf{j}_m C_\alpha + \mathbf{h}_\alpha) = m_\alpha, \quad \alpha = \overline{1, N}.$$

Закон сохранения массы

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j}_m = 0.$$

Легко заметить, что это уравнение является суммой N предыдущих уравнений, выражающих законы сохранения масс отдельных компонентов.

Закон сохранения импульса

Считая, что величина силы, действующей на границе $\partial V(t)$ области $V(t)$, определяется с помощью тензора напряжений \mathbf{P} , имеем:

$$\mathbf{p}^{(n)} = \mathbf{n} \cdot \mathbf{P}.$$

Отсюда:

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{u}_m \otimes \rho \mathbf{u} - \mathbf{P}) = \rho \mathbf{f}.$$

Величина

$$\mathbf{A} = \mathbf{u}_m \otimes \rho \mathbf{u} - \mathbf{P}$$

является тензором плотности потока импульса.

Баланс микросил

Уравнения баланса микросил и микронапряжений имеют вид:

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \boldsymbol{\xi}_\alpha + \pi_\alpha + \gamma_\alpha &= 0, \quad \alpha = \overline{1, N-1}, \\ \operatorname{div} \boldsymbol{\xi} + \pi + \gamma &= 0. \end{aligned}$$

Закон сохранения энергии

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \operatorname{div} (\rho E \mathbf{u}_m) &= \\ &= \mathbf{j}_m \cdot \mathbf{f} + \operatorname{div} \mathbf{a} - \operatorname{div} \mathbf{q} + \rho r + \left[\operatorname{div} \left(\frac{d\rho}{dt} \boldsymbol{\xi} \right) + \frac{d\rho}{dt} \gamma \right] + \\ &+ \sum_{\alpha=1}^{N-1} \left[\mu_\alpha m_\alpha - \operatorname{div} (\mu_\alpha \mathbf{h}_\alpha) + \operatorname{div} \left(\frac{dC_\alpha}{dt} \boldsymbol{\xi}_\alpha \right) + \frac{dC_\alpha}{dt} \gamma_\alpha \right], \quad (18) \end{aligned}$$

где

$$E = \varepsilon + \frac{\mathbf{u}^2}{2}$$

— массовая плотность полной энергии.

Недивергентные слагаемые в правой части уравнения соответствуют мощности внешних сил и микросил, а также внешним источникам энергии.

Второй закон термодинамики

$$\frac{\partial(\rho s)}{\partial t} + \operatorname{div} \left(\rho s \mathbf{u}_m + \frac{1}{T} \mathbf{q} \right) - \frac{\rho r}{T} \geq 0.$$

Закон сохранения момента импульса

Исходя из предположения о выполнении закона сохранения момента импульса, вид тензора напряжений получается точно так же, как в работе [8]:

$$\mathbf{P} = \mathbf{P}^s + \rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{w}, \quad (19)$$

где \mathbf{P}^s — некоторый симметричный тензор второго ранга. В то же время этого достаточно для выполнения закона сохранения момента импульса, в чем можно убедиться непосредственной подстановкой.

При таком выборе \mathbf{P} тензор плотности потока импульса является симметричным и имеет следующее выражение:

$$\mathbf{A} = \mathbf{u}_m \otimes \rho \mathbf{u} - \mathbf{P} = -\mathbf{P}^s + \rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} - \rho (\mathbf{w} \otimes \mathbf{u} + \mathbf{u} \otimes \mathbf{w}).$$

6.2 Законы сохранения в лагранжевой форме

Закон сохранения массы для компонентов

$$\rho \frac{dC_\alpha}{dt} = -\operatorname{div} \mathbf{h}_\alpha + m_\alpha, \quad \alpha = \overline{1, N}. \quad (20)$$

Закон сохранения массы

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho \operatorname{div} \mathbf{u}_m. \quad (21)$$

Закон сохранения импульса

$$\rho \frac{d\mathbf{u}}{dt} = \operatorname{div} \mathbf{P} + \rho \mathbf{f}. \quad (22)$$

Баланс микросил

Так как в уравнения баланса микросил и микронапряжений не входят производные по времени, они имеют точно такой же вид, как и ранее:

$$\operatorname{div} \boldsymbol{\xi}_\alpha + \pi_\alpha + \gamma_\alpha = 0, \quad \alpha = \overline{1, N-1}, \quad (23)$$

$$\operatorname{div} \boldsymbol{\xi} + \pi + \gamma = 0. \quad (24)$$

Закон сохранения энергии

$$\begin{aligned} \rho \frac{dE}{dt} &\equiv \rho \left(\frac{d\varepsilon}{dt} + \mathbf{u} \cdot \frac{d\mathbf{u}}{dt} \right) = \\ &= \mathbf{j}_m \cdot \mathbf{f} + \operatorname{div} \mathbf{a} - \operatorname{div} \mathbf{q} + \rho r + \left[\operatorname{div} \left(\frac{d\rho}{dt} \boldsymbol{\xi} \right) + \frac{d\rho}{dt} \gamma \right] + \\ &+ \sum_{\alpha=1}^{N-1} \left[\mu_\alpha m_\alpha - \operatorname{div} (\mu_\alpha \mathbf{h}_\alpha) + \operatorname{div} \left(\frac{dC_\alpha}{dt} \boldsymbol{\xi}_\alpha \right) + \frac{dC_\alpha}{dt} \gamma_\alpha \right]. \quad (25) \end{aligned}$$

Второй закон термодинамики

$$\rho \frac{ds}{dt} + \operatorname{div} \left(\frac{\mathbf{q}}{T} \right) - \frac{\rho r}{T} \geq 0. \quad (26)$$

7 Диссипативное неравенство для свободной энергии

Получим уравнение баланса внутренней энергии. Для этого умножим:

- уравнение (22) — на \mathbf{u} , получим:

$$\rho \mathbf{u} \cdot \frac{d\mathbf{u}}{dt} = \mathbf{u} \cdot \operatorname{div} \mathbf{P} + \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{f},$$

или

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} \rho \mathbf{u}^2 \right) + \left(\frac{1}{2} \rho \mathbf{u}^2 \right) \operatorname{div} \mathbf{u}_m = \operatorname{div} (\mathbf{P} \cdot \mathbf{u}) - \mathbf{P} : (\nabla \otimes \mathbf{u}) + \rho \mathbf{f} \cdot \mathbf{u}.$$

- уравнение (23) — на dC_α/dt ,
- уравнение (24) — на $d\rho/dt$,
- уравнение (20) — на μ_α ,

и подставим результат в уравнение энергии (25). В результате получим:

$$\begin{aligned} \rho \frac{d\varepsilon}{dt} + \mathbf{u} \cdot \operatorname{div} \mathbf{P} + \rho \mathbf{w} \cdot \mathbf{f} &= \operatorname{div} \mathbf{a} - \operatorname{div} \mathbf{q} + \\ &+ \sum_{\alpha=1}^{N-1} \left[\boldsymbol{\xi}_\alpha \cdot \nabla \left(\frac{dC_\alpha}{dt} \right) - \pi_\alpha \frac{dC_\alpha}{dt} \right] + \left[\boldsymbol{\xi} \cdot \nabla \left(\frac{d\rho}{dt} \right) - \pi \frac{d\rho}{dt} \right] + \\ &+ \sum_{\alpha=1}^{N-1} \mu_\alpha \rho \frac{dC_\alpha}{dt} - \sum_{\alpha=1}^{N-1} \mathbf{h}_\alpha \cdot \nabla \mu_\alpha + \rho r. \end{aligned} \quad (27)$$

Получим теперь диссипативное неравенство для свободной энергии Гельмгольца. Выражение для свободной энергии Гельмгольца единицы массы имеет вид:

$$\Psi = \varepsilon - Ts, \quad (28)$$

где s — энтропия единицы массы.

Вычисляя полную производную по времени обеих частей (28), получим:

$$\frac{d\varepsilon}{dt} - T \frac{ds}{dt} = \frac{d\Psi}{dt} + s \frac{dT}{dt}.$$

Отсюда, воспользовавшись вторым началом термодинамики (26) и балансовым уравнением для внутренней энергии (27), получим неравенство для свободной энергии Гельмгольца:

$$\begin{aligned} \rho \frac{d\Psi}{dt} &\leq -\rho s \frac{dT}{dt} - \mathbf{u} \cdot \operatorname{div} \mathbf{P} - \rho \mathbf{w} \cdot \mathbf{f} + \operatorname{div} \mathbf{a} + \\ &+ \sum_{\alpha=1}^{N-1} \left[\boldsymbol{\xi}_\alpha \cdot \nabla \left(\frac{dC_\alpha}{dt} \right) - \pi_\alpha \frac{dC_\alpha}{dt} \right] + \left[\boldsymbol{\xi} \cdot \nabla \left(\frac{d\rho}{dt} \right) - \pi \frac{d\rho}{dt} \right] + \\ &+ \sum_{\alpha=1}^{N-1} \mu_\alpha \rho \frac{dC_\alpha}{dt} - \sum_{\alpha=1}^{N-1} \mathbf{h}_\alpha \cdot \nabla \mu_\alpha - \frac{\mathbf{q}}{T} \cdot \nabla T. \end{aligned} \quad (29)$$

8 Процедура Колмана–Нолла

В настоящем разделе полученное выше неравенство для свободной энергии будет использовано для нахождения вида определяющих соотношений, замыкающих модель. Указанная процедура называется процедурой Колмана–Нолла [3]. Она основана на той идее, что, как только определен факт наличия функциональных связей между параметрами, описывающими течение, неравенство для свободной энергии можно рассматривать не как ограничение на термодинамический процесс, а как ограничение на реологические и другие соотношения, определяющие модель процесса.

Для дальнейшего нам понадобится несколько технических утверждений.

Утверждение 1. *Для градиента произвольного векторного поля \mathbf{u} справедливо следующее представление:*

$$\nabla \otimes \mathbf{u} = \mathbf{L}_u^d + \mathbf{L}_u^h + \mathbf{S}_u,$$

или

$$\nabla \otimes \mathbf{u} = \mathbf{D}_u + \mathbf{L}_u^h,$$

где

$$\mathbf{L}_u^d = \frac{1}{2}[(\nabla \otimes \mathbf{u}) + (\nabla \otimes \mathbf{u})^T] - \frac{1}{3}(\operatorname{div} \mathbf{u}) \mathbf{I}, \quad \mathbf{L}_u^h = \frac{1}{3} \operatorname{tr}(\nabla \otimes \mathbf{u}) \mathbf{I} \equiv \frac{1}{3}(\operatorname{div} \mathbf{u}) \mathbf{I}$$

— девиатор и шаровая часть тензора градиента \mathbf{u} ,

$$\mathbf{S}_u = \frac{1}{2}[\nabla \otimes \mathbf{u} - (\nabla \otimes \mathbf{u})^T]$$

— его кососимметричная часть,

$$\mathbf{D}_u = \mathbf{L}_u^d + \mathbf{S}_u$$

— его часть с нулевым следом.

Утверждение 2. *Для любой скалярной величины α справедливо тождество:*

$$\nabla \left(\frac{d\alpha}{dt} \right) = \frac{d}{dt}(\nabla \alpha) + \mathbf{D}_{u_m}^T \cdot \nabla \alpha - \frac{1}{3\rho} \frac{d\rho}{dt} \nabla \alpha.$$

Доказательство. Имеем:

$$\nabla \left(\frac{d\alpha}{dt} \right) = \nabla \left(\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \mathbf{u}_m \cdot \nabla \alpha \right) = \frac{\partial(\nabla \alpha)}{\partial t} + \nabla (\mathbf{u}_m \cdot \nabla \alpha). \quad (30)$$

Преобразуем второе слагаемое:

$$[\nabla(\mathbf{u}_m \cdot \nabla \alpha)]_i = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(u_{m,j} \frac{\partial \alpha}{\partial x_j} \right) = u_{m,j} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial \alpha}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial u_{m,j}}{\partial x_i} \frac{\partial \alpha}{\partial x_j}.$$

Следовательно:

$$\left[\nabla \left(\frac{d\alpha}{dt} \right) \right]_i = \left[\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \alpha}{\partial x_i} \right) + u_{m,j} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial \alpha}{\partial x_i} \right) \right] + \frac{\partial u_{m,j}}{\partial x_i} \frac{\partial \alpha}{\partial x_j}$$

Тогда окончательно:

$$\begin{aligned} \nabla \left(\frac{d\alpha}{dt} \right) &= \frac{d}{dt} (\nabla \alpha) + (\nabla \otimes \mathbf{u}_m)^T \cdot \nabla \alpha = \frac{d}{dt} (\nabla \alpha) + (\mathbf{D}_{u_m}^T + \mathbf{L}_{u_m}^h) \cdot \nabla \alpha = \\ &= \frac{d}{dt} (\nabla \alpha) + \left(\mathbf{D}_{u_m}^T + \frac{1}{3} \mathbf{I} \operatorname{div} \mathbf{u}_m \right) \cdot \nabla \alpha = \frac{d}{dt} (\nabla \alpha) + \mathbf{D}_{u_m}^T \cdot \nabla \alpha - \frac{1}{3\rho} \frac{d\rho}{dt} \nabla \alpha. \end{aligned}$$

□

Утверждение 3. Пусть \mathbf{A} – симметричный тензор второго ранга, \mathbf{B} – произвольный тензор второго ранга. Тогда

$$\mathbf{A} : \mathbf{B} = \mathbf{A}^d : \mathbf{B}^d + \mathbf{A}^h : \mathbf{B}^h,$$

где верхними индексами « d » и « h » обозначены девиатор и шаровая часть соответствующего тензора.

В частности, при $\mathbf{B} = \nabla \otimes \mathbf{u}$ получаем:

$$\mathbf{A} : (\nabla \otimes \mathbf{u}) = \mathbf{A}^d : \mathbf{L}_u^d + \frac{1}{3} (\operatorname{div} \mathbf{u}) \operatorname{tr} \mathbf{A}.$$

Доказательство. Доказательство сводится к непосредственной проверке тождества с учетом того, что свертки (i) симметричного и кососимметричного тензора и (ii) шарового тензора и тензора с нулевым следом равны нулю.

□

Перейдем теперь непосредственно к реализации процедуры Колмана–Нолла, следуя [2]. Для этого преобразуем неравенство (29) для свободной энергии.

Рассмотрим сначала третью строку неравенства (29). В соответствии с утверждением 2 имеем для ρ и C_α , $\alpha = \overline{1, N-1}$:

$$\nabla \left(\frac{d\rho}{dt} \right) = \frac{d}{dt} (\nabla \rho) + \mathbf{D}_{u_m}^T \cdot \nabla \rho - \frac{1}{3\rho} \frac{d\rho}{dt} \nabla \rho, \quad (31)$$

$$\nabla \left(\frac{dC_\alpha}{dt} \right) = \frac{d}{dt} (\nabla C_\alpha) + \mathbf{D}_{u_m}^T \cdot \nabla C_\alpha - \frac{1}{3\rho} \frac{d\rho}{dt} \nabla C_\alpha. \quad (32)$$

Отсюда получаем:

$$\begin{aligned}
\xi \cdot \nabla \left(\frac{d\rho}{dt} \right) - \pi \frac{d\rho}{dt} &= \\
&= \xi \cdot \frac{d}{dt}(\nabla \rho) + \xi \cdot \mathbf{D}_{u_m}^T \cdot \nabla \rho - \frac{1}{3\rho} \frac{d\rho}{dt} \xi \cdot \nabla \rho - \pi \frac{d\rho}{dt} = \\
&= \xi \cdot \frac{d}{dt}(\nabla \rho) + (\nabla \rho \otimes \xi) : \mathbf{D}_{u_m} - \frac{1}{3\rho} \frac{d\rho}{dt} \xi \cdot \nabla \rho - \pi \frac{d\rho}{dt}
\end{aligned}$$

и

$$\begin{aligned}
\xi_\alpha \cdot \nabla \left(\frac{dC_\alpha}{dt} \right) - \pi_\alpha \frac{dC_\alpha}{dt} &= \\
&= \xi_\alpha \cdot \frac{d}{dt}(\nabla C_\alpha) + \xi_\alpha \cdot \mathbf{D}_{u_m}^T \cdot \nabla C_\alpha - \frac{1}{3\rho} \frac{d\rho}{dt} \xi_\alpha \cdot \nabla C_\alpha - \pi_\alpha \frac{dC_\alpha}{dt} = \\
&= \xi_\alpha \cdot \frac{d}{dt}(\nabla C_\alpha) + (\nabla C_\alpha \otimes \xi_\alpha) : \mathbf{D}_{u_m} - \frac{1}{3\rho} \frac{d\rho}{dt} \xi_\alpha \cdot \nabla C_\alpha - \pi_\alpha \frac{dC_\alpha}{dt}.
\end{aligned}$$

Тогда для второй строки неравенства (29) имеем:

$$\begin{aligned}
\sum_{\alpha=1}^{N-1} \left[\xi_\alpha \cdot \nabla \left(\frac{dC_\alpha}{dt} \right) - \pi_\alpha \frac{dC_\alpha}{dt} \right] + \left[\xi \cdot \nabla \left(\frac{d\rho}{dt} \right) - \pi \frac{d\rho}{dt} \right] &= \\
= \sum_{\alpha=1}^{N-1} \left[\xi_\alpha \cdot \frac{d}{dt}(\nabla C_\alpha) - \pi_\alpha \frac{dC_\alpha}{dt} \right] + \left[\xi \cdot \frac{d}{dt}(\nabla \rho) - \pi \frac{d\rho}{dt} \right] + \\
+ \mathbf{Q} : \mathbf{D}_{u_m} - \frac{1}{3\rho} \frac{d\rho}{dt} \operatorname{tr} \mathbf{Q}, \quad (33)
\end{aligned}$$

где

$$\mathbf{Q} := \sum_{\alpha=1}^{N-1} \nabla C_\alpha \otimes \xi_\alpha + \nabla \rho \otimes \xi \quad (34)$$

и, соответственно,

$$\operatorname{tr} \mathbf{Q} = \sum_{\alpha=1}^{N-1} \nabla C_\alpha \cdot \xi_\alpha + \nabla \rho \cdot \xi.$$

Для слагаемого $\mathbf{u} \cdot \operatorname{div} \mathbf{P}$ в первой строке неравенства (29), учитывая вид тензора напряжений (19), получим

$$\mathbf{u} \cdot \operatorname{div} \mathbf{P} = \mathbf{u} \cdot \operatorname{div} \mathbf{P}^s + \mathbf{u} \cdot \operatorname{div} (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{w}). \quad (35)$$

Представим \mathbf{P}^s в виде суммы девиатора и шаровой части:

$$\mathbf{P}^s = \mathbf{P}^d + \bar{p} \mathbf{I}, \quad \bar{p} = \frac{1}{3} \operatorname{tr} \mathbf{P}^s. \quad (36)$$

Тогда для первого слагаемого в (35) имеем:

$$\begin{aligned}
\mathbf{u} \cdot \operatorname{div} \mathbf{P}^s &= \mathbf{u} \cdot \operatorname{div} \mathbf{P}^d + \mathbf{u} \cdot \nabla \bar{p} = \\
&= \mathbf{u} \cdot \operatorname{div} \mathbf{P}^d + \mathbf{u}_m \cdot \nabla \bar{p} + \mathbf{w} \cdot \nabla \bar{p} = \\
&= \mathbf{u} \cdot \operatorname{div} \mathbf{P}^d + \operatorname{div}(\bar{p} \mathbf{u}_m) - \bar{p} \operatorname{div} \mathbf{u}_m + \mathbf{w} \cdot \nabla \bar{p} = \\
&= \mathbf{u} \cdot \operatorname{div} \mathbf{P}^d + \operatorname{div}(\bar{p} \mathbf{u}_m) + \bar{p} \frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dt} + \mathbf{w} \cdot \nabla \bar{p},
\end{aligned} \tag{37}$$

где, далее,

$$\begin{aligned}
\mathbf{u} \cdot \operatorname{div} \mathbf{P}^d &= \operatorname{div}(\mathbf{P}^d \cdot \mathbf{u}) - \mathbf{P}^d : (\nabla \otimes \mathbf{u})^T = \\
&= \operatorname{div}(\mathbf{P}^d \cdot \mathbf{u}) - \mathbf{P}^d : (\mathbf{L}_u^d + \mathbf{L}_u^h + \mathbf{S}_u)^T = \\
&= \operatorname{div}(\mathbf{P}^d \cdot \mathbf{u}) - \mathbf{P}^d : \mathbf{L}_u^d.
\end{aligned}$$

Подставляя результат в (37), получим:

$$\mathbf{u} \cdot \operatorname{div} \mathbf{P}^s = -\mathbf{P}^d : \mathbf{L}_u^d + \operatorname{div}(\mathbf{P}^d \cdot \mathbf{u} + \bar{p} \mathbf{u}_m) + \mathbf{w} \cdot \nabla \bar{p} + \bar{p} \frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dt}$$

и, как следствие, из (35):

$$\begin{aligned}
\mathbf{u} \cdot \operatorname{div} \mathbf{P} &= -\mathbf{P}^d : \mathbf{L}_u^d + \operatorname{div}(\mathbf{P}^d \cdot \mathbf{u} + \bar{p} \mathbf{u}_m) + \\
&\quad + \mathbf{w} \cdot \nabla \bar{p} + \bar{p} \frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dt} + \mathbf{u} \cdot \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{w}). \tag{38}
\end{aligned}$$

Подставим теперь выражения (33) и (38) в неравенство для свободной энергии (29). После перегруппировки слагаемых, получим:

$$\begin{aligned}
\rho \frac{d\Psi}{dt} &\leq \frac{dT}{dt}(-\rho s) + \frac{d\rho}{dt} \left[-\frac{1}{\rho} \bar{p} - \frac{1}{\rho} \left(\frac{1}{3} \operatorname{tr} \mathbf{Q} \right) - \pi \right] + \frac{d}{dt}(\nabla \rho) \cdot \boldsymbol{\xi} + \\
&\quad + \sum_{\alpha=1}^{N-1} \frac{dC_\alpha}{dt} (-\pi_\alpha + \rho \mu_\alpha) + \sum_{\alpha=1}^{N-1} \frac{d}{dt}(\nabla C_\alpha) \cdot \boldsymbol{\xi}_\alpha - \\
&\quad - \sum_{\alpha=1}^{N-1} \mathbf{h}_\alpha \cdot \nabla \mu_\alpha - \frac{\mathbf{q}}{T} \cdot \nabla T + \Delta,
\end{aligned} \tag{39}$$

где

$$\begin{aligned}
\Delta &= \operatorname{div} \mathbf{a} - \rho \mathbf{w} \cdot \mathbf{f} - \operatorname{div}(\mathbf{P}^d \cdot \mathbf{u} + \bar{p} \mathbf{u}_m) + \mathbf{P}^d : \mathbf{L}_u^d - \\
&\quad - \mathbf{w} \cdot \nabla \bar{p} + \mathbf{Q} : \mathbf{D}_{u_m} - \mathbf{u} \cdot \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{w}).
\end{aligned}$$

После перегруппировки слагаемых в последнем выражении получим:

$$\begin{aligned} \Delta = \operatorname{div} (\mathbf{a} - \mathbf{P}^d \cdot \mathbf{u} - \bar{p}\mathbf{u}_m) + \mathbf{w} \cdot (-\rho\mathbf{f} - \nabla\bar{p}) + \\ + (\mathbf{P}^d : \mathbf{L}_u^d + \mathbf{Q} : \mathbf{D}_{u_m}) - \mathbf{u} \cdot \operatorname{div} (\rho\mathbf{u} \otimes \mathbf{w}). \end{aligned} \quad (40)$$

Для третьего слагаемого в (40) имеем:

$$\begin{aligned} \mathbf{P}^d : \mathbf{L}_u^d + \mathbf{Q} : \mathbf{D}_{u_m} &= \mathbf{P}^d : \mathbf{L}_u^d + \mathbf{Q} : \mathbf{L}_{u_m}^d + \mathbf{Q} : \mathbf{S}_{u_m} = \\ &= \mathbf{P}^d : \mathbf{L}_u^d + \mathbf{Q}^d : \mathbf{L}_{u_m}^d + \mathbf{Q} : \mathbf{S}_{u_m} = \mathbf{P}^d : \mathbf{L}_u^d + \mathbf{Q}^d : (\mathbf{L}_u^d - \mathbf{L}_w^d) + \mathbf{Q} : \mathbf{S}_{u_m} = \\ &= (\mathbf{P}^d + \mathbf{Q}^d) : \mathbf{L}_u^d - \mathbf{Q}^d : \mathbf{L}_w^d + \mathbf{Q} : \mathbf{S}_{u_m} = \\ &= (\mathbf{P}^d + \mathbf{Q}^d) : \mathbf{L}_u^d - \operatorname{div}(\mathbf{Q}^d \cdot \mathbf{w}) + \mathbf{w} \cdot \operatorname{div} \mathbf{Q}^d + \mathbf{Q} : \mathbf{S}_{u_m}. \end{aligned}$$

Здесь было использовано разложение:

$$\mathbf{Q} = \mathbf{Q}^d + \mathbf{Q}^h + \mathbf{Q}^a,$$

где индексами d , h и a обозначены соответственно девиатор, шаровая часть и кососимметричная часть тензора \mathbf{Q} :

$$\mathbf{Q}^d = \frac{1}{2} (\mathbf{Q} + \mathbf{Q}^T) - \mathbf{Q}^h, \quad \mathbf{Q}^h = \frac{1}{3} \operatorname{tr} \mathbf{Q}, \quad \mathbf{Q}^a = \frac{1}{2} (\mathbf{Q} - \mathbf{Q}^T).$$

Также использовано тождество $\mathbf{Q}^d : \mathbf{L}_w^d = \mathbf{Q}^d : (\nabla \otimes \mathbf{w})$.

Для последнего слагаемого в (40) получим:

$$\begin{aligned} \mathbf{u} \cdot \operatorname{div} (\rho\mathbf{u} \otimes \mathbf{w}) &= u_j \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i w_j) = \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i u_j w_j) - \rho u_i w_j \frac{\partial u_j}{\partial x_i} = \\ &= \operatorname{div} (\rho\mathbf{u}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{w})) - \rho\mathbf{w} \cdot (\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u}. \end{aligned}$$

Подставляя результаты последних преобразований в (40), придем к выражению:

$$\begin{aligned} \Delta &= (\mathbf{P}^d + \mathbf{Q}^d) : \mathbf{L}_u^d + \mathbf{Q} : \mathbf{S}_{u_m} + \\ &+ \operatorname{div} (\mathbf{a} - \mathbf{P}^d \cdot \mathbf{u} - \bar{p}\mathbf{u}_m - \rho\mathbf{u}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{w}) - \mathbf{Q}^d \cdot \mathbf{w}) + \\ &+ \mathbf{w} \cdot (-\rho\mathbf{f} - \nabla\bar{p} + \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} + \operatorname{div} \mathbf{Q}^d). \end{aligned} \quad (41)$$

Далее, в соответствии с принципом равноприсутствия [9, 10, 11] будем считать, что массовая плотность свободной энергии $\Psi = \Psi(\mathcal{X})$ зависит от следующего вектора параметров:

$$\mathcal{X} = \left\{ \rho, \nabla\rho, \frac{d\rho}{dt}, C_\alpha, \nabla C_\alpha, \frac{dC_\alpha}{dt}, T, \nabla T, \mu_\alpha, \nabla \otimes \mathbf{u} \right\},$$

где $\alpha = \overline{1, N-1}$.

Тогда для полной производной по времени свободной энергии Ψ имеем:

$$\frac{d\Psi}{dt} = \sum_{\bar{\mathcal{X}} \in \mathcal{X}} \frac{\partial \Psi}{\partial \bar{\mathcal{X}}} \frac{d\bar{\mathcal{X}}}{dt}. \quad (42)$$

Подставив соотношения (41) и (42) в неравенство для свободной энергии (39), получим:

$$\begin{aligned} 0 \leq & \frac{dT}{dt} \left(-\rho \frac{\partial \Psi}{\partial T} - \rho s \right) - \sum_{\alpha=1}^{N-1} \mathbf{h}_\alpha \cdot \nabla \mu_\alpha - \frac{\mathbf{q}}{T} \cdot \nabla T + \\ & + \frac{d\rho}{dt} \left[-\rho \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} - \frac{1}{\rho} \bar{p} - \frac{1}{\rho} \left(\frac{1}{3} \text{tr} \mathbf{Q} \right) - \pi \right] + \frac{d}{dt} (\nabla \rho) \cdot \left(-\rho \frac{\partial \Psi}{\partial (\nabla \rho)} + \boldsymbol{\xi} \right) + \\ & + \sum_{\alpha=1}^{N-1} \frac{dC_\alpha}{dt} \left(-\rho \frac{\partial \Psi}{\partial C_\alpha} - \pi_\alpha + \rho \mu_\alpha \right) + \sum_{\alpha=1}^{N-1} \frac{d}{dt} (\nabla C_\alpha) \cdot \left(-\rho \frac{\partial \Psi}{\partial (\nabla C_\alpha)} + \boldsymbol{\xi}_\alpha \right) - \\ & + (\mathbf{P}^d + \mathbf{Q}^d) : \mathbf{L}_u^d + \mathbf{Q} : \mathbf{S}_{u_m} + \Delta_2 + \Delta_3, \end{aligned} \quad (43)$$

где

$$\begin{aligned} \Delta_2 = & \text{div} \left(\mathbf{a} - \mathbf{P}^d \cdot \mathbf{u} - \bar{p} \mathbf{u}_m - \rho \mathbf{u} (\mathbf{u} \cdot \mathbf{w}) - \mathbf{Q}^d \cdot \mathbf{w} \right) + \\ & + \mathbf{w} \cdot \left(-\rho \mathbf{f} - \nabla \bar{p} + \rho (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \text{div} \mathbf{Q}^d \right), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Delta_3 = & \frac{\partial \Psi}{\partial (d\rho/dt)} \frac{d^2 \rho}{dt^2} + \sum_{\alpha=1}^{N-1} \frac{\partial \Psi}{\partial (dC_\alpha/dt)} \frac{d^2 C_\alpha}{dt^2} + \frac{\partial \Psi}{\partial (\nabla T)} \cdot \frac{d(\nabla T)}{dt} + \\ & + \sum_{\alpha=1}^{N-1} \frac{\partial \Psi}{\partial \mu_\alpha} \frac{d\mu_\alpha}{dt} + \frac{\partial \Psi}{\partial (\nabla \otimes \mathbf{u})} : \frac{d(\nabla \otimes \mathbf{u})}{dt}. \end{aligned}$$

Следующие условия достаточны для выполнения этого неравенства:

- свободная энергия единицы массы зависит только от набора переменных $\rho, \nabla \rho, C_\alpha, \nabla C_\alpha, T$, где $\alpha = \overline{1, N-1}$. При этом получаем $\Delta_3 = 0$;
- энтропия единицы массы определяется как:

$$s = -\frac{\partial \Psi}{\partial T}; \quad (44)$$

- микронапряжения задаются соотношениями:

$$\boldsymbol{\xi} = \rho \frac{\partial \Psi}{\partial (\nabla \rho)}, \quad \boldsymbol{\xi}_\alpha = \rho \frac{\partial \Psi}{\partial (\nabla C_\alpha)}, \quad \alpha = \overline{1, N-1}; \quad (45)$$

- выражения для микросил имеют вид:

$$\pi = -\rho \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} - \frac{1}{\rho} \bar{p} - \frac{1}{\rho} \left(\frac{1}{3} \text{tr} \mathbf{Q} \right) - B_\rho \frac{d\rho}{dt}, \quad (46)$$

$$\pi_\alpha = -\rho \frac{\partial \Psi}{\partial C_\alpha} + \rho \mu_\alpha - B_\alpha \frac{dC_\alpha}{dt}, \quad \alpha = \overline{1, N-1}, \quad (47)$$

где $B_\rho, B_\alpha, \alpha = \overline{1, N-1}$ — неотрицательные скалярные величины;

- определяющее соотношение для вектора плотности потока массы компонента α имеет вид:

$$\mathbf{h}_\alpha = -\mathbf{M}_\alpha \cdot \nabla \mu_\alpha, \quad \alpha = \overline{1, N-1}, \quad (48)$$

где $\mathbf{M}_\alpha, \alpha = \overline{1, N-1}$ — симметричные неотрицательно определенные тензоры второго ранга;

- вектор плотности теплового потока определен как:

$$\mathbf{q} = -\mathbf{K} \cdot \nabla T, \quad (49)$$

где \mathbf{K} — симметричный неотрицательно определенный тензор второго ранга;

- девиатор тензора \mathbf{P}^s задается в соответствии с:

$$\mathbf{P}^d = \mathbf{G} : \mathbf{L}_u^d - \frac{1}{3} \text{tr} (\mathbf{G} : \mathbf{L}_u^d) \mathbf{I} - \left(\mathbf{Q}^s - \frac{1}{3} \text{tr} \mathbf{Q}^s \right),$$

где \mathbf{Q}^s — симметричная часть тензора \mathbf{Q} ,

$$\mathbf{Q}^s = \frac{1}{2} (\mathbf{Q} + \mathbf{Q}^T);$$

- тензор \mathbf{Q} является симметричным. Как будет видно ниже, это условие является ограничением на вид функциональной зависимости свободной энергии Ψ от своих аргументов.

Выражение для девиатора тензора \mathbf{P}^s упрощается:

$$\mathbf{P}^d = \mathbf{G} : \mathbf{L}_u^d - \frac{1}{3} \text{tr} (\mathbf{G} : \mathbf{L}_u^d) \mathbf{I} - \mathbf{Q}^d, \quad (50)$$

где \mathbf{Q}^d — девиатор тензора \mathbf{Q} .

Тензор \mathbf{G} является неотрицательно определенным тензором четвертого ранга, задающим линейное отображение пространства симметричных тензоров второго ранга в себя.

После подстановки описанных соотношений в неравенство для свободной энергии (43) получим:

$$0 \leq \mathbf{L}_u^d : \mathbf{G} : \mathbf{L}_u^d + B_\rho \left(\frac{d\rho}{dt} \right)^2 + \sum_{\alpha=1}^{N-1} B_\alpha \left(\frac{dC_\alpha}{dt} \right)^2 + \sum_{\alpha=1}^{N-1} \nabla \mu_\alpha \cdot \mathbf{M}_\alpha \cdot \nabla \mu_\alpha + \nabla T \cdot \mathbf{K} \cdot \nabla T + \Delta_2. \quad (51)$$

В этом неравенстве все слагаемые, кроме Δ_2 , всегда являются неотрицательными. Выбирая \mathbf{w} и \mathbf{a} , обеспечим неотрицательность Δ_2 и, как следствие, выполнение неравенства (51). Это можно сделать двумя способами, причем:

- оба замыкания приводят к одинаковому набору всех определяющих соотношений модели, за исключением выражений для векторов \mathbf{a} и \mathbf{w} ;
- в первом замыкании вектор \mathbf{w} , обеспечивающий справедливость неравенства для свободной энергии и энтропийного неравенства, задается *неявно*, то есть должен удовлетворять определенному дифференциальному уравнению. Во втором замыкании \mathbf{w} явно выражается через остальные параметры задачи;
- оба замыкания совпадают, если объемная вязкость равна нулю.

Рассмотрим эти замыкания последовательно.

8.1 Замыкание I

Определим \mathbf{a} и \mathbf{w} так, чтобы в неравенстве (51) слагаемое, содержащее \mathbf{a} , стало равным нулю, а слагаемое, содержащее (в виде множителя) \mathbf{w} , всегда было бы положительным. Тогда получим:

- определяющее соотношение для вектора \mathbf{w} :

$$\mathbf{w}_1 = \tau \frac{1}{\rho} \left(-\rho \mathbf{f} - \nabla \bar{p} + \rho (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \operatorname{div} \mathbf{Q}^d \right). \quad (52)$$

Здесь τ — некоторая положительная скалярная величина, имеющая размерность времени;

- определяющее соотношение для вектора \mathbf{a} :

$$\mathbf{a}_1 = \mathbf{P}^d \cdot \mathbf{u} + \bar{p} \mathbf{u}_m + \rho \mathbf{u} (\mathbf{u} \cdot \mathbf{w}) + \mathbf{Q}^d \cdot \mathbf{w}.$$

Тогда получим

$$\Delta_2 = \frac{\rho}{\tau} \mathbf{w}_1^2,$$

и неравенство (51) примет вид:

$$\begin{aligned} 0 \leq \mathbf{L}_u^d : \mathbf{G} : \mathbf{L}_u^d + B_\rho \left(\frac{d\rho}{dt} \right)^2 + \sum_{\alpha=1}^{N-1} B_\alpha \left(\frac{dC_\alpha}{dt} \right)^2 + \\ + \sum_{\alpha=1}^{N-1} \nabla \mu_\alpha \cdot \mathbf{M}_\alpha \cdot \nabla \mu_\alpha + \nabla T \cdot \mathbf{K} \cdot \nabla T + \frac{\rho}{\tau} \mathbf{w}_1^2, \end{aligned}$$

что всегда выполняется при указанных выше свойствах коэффициентов переноса.

Полученные определяющие соотношения также приводят к выполнению энтропийного неравенства (26), а именно, по существу повторяя описанную выше процедуру «в обратном порядке», можно показать, что:

$$\begin{aligned} \mathcal{D} := \rho \frac{ds}{dt} + \operatorname{div} \frac{\mathbf{q}}{T} - \frac{\rho r}{T} = \frac{1}{T} \mathbf{L}_u^d : \mathbf{G} : \mathbf{L}_u^d + \\ + \frac{1}{T} \left[B_\rho \left(\frac{d\rho}{dt} \right)^2 + \sum_{\alpha=1}^{N-1} B_\alpha \left(\frac{dC_\alpha}{dt} \right)^2 + \sum_{\alpha=1}^{N-1} \nabla \mu_\alpha \cdot \mathbf{M}_\alpha \cdot \nabla \mu_\alpha \right] + \\ + \frac{1}{T^2} \nabla T \cdot \mathbf{K} \cdot \nabla T + \frac{\rho}{T\tau} \mathbf{w}_1^2 \geq 0. \end{aligned}$$

8.2 Замыкание II

Сначала получим выражение для \bar{p} . Для этого выразим его из соотношения (46), используем закон сохранения массы (21) и уравнение баланса микросил и микронапряжений (24). Получим:

$$\bar{p} = \rho \operatorname{div} \boldsymbol{\xi} - \rho^2 \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} - \frac{1}{3} \operatorname{tr} \mathbf{Q} + \rho \gamma + B_\rho \rho^2 \operatorname{div} \mathbf{u}_m.$$

С учетом определения (2) массовой скорости, представим ее в виде двух слагаемых, а именно:

$$\bar{p} = \tilde{p} - B_\rho \rho^2 \operatorname{div} \mathbf{w}, \quad (53)$$

где:

$$\tilde{p} = \rho \operatorname{div} \boldsymbol{\xi} - \rho^2 \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} - \frac{1}{3} \operatorname{tr} \mathbf{Q} + \rho \gamma + B_\rho \rho^2 \operatorname{div} \mathbf{u}. \quad (54)$$

Подставляя это выражение в Δ_2 , получим:

$$\begin{aligned} \Delta_2 = \operatorname{div} \left[\mathbf{a} - \mathbf{P}^d \cdot \mathbf{u} - \tilde{p} \mathbf{u}_m - \rho \mathbf{u} (\mathbf{u} \cdot \mathbf{w}) - \mathbf{Q}^d \cdot \mathbf{w} + B_\rho \rho^2 \mathbf{u} \operatorname{div} \mathbf{w} \right] + \\ + \mathbf{w} \cdot \left[-\rho \mathbf{f} - \nabla \tilde{p} + \rho (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \operatorname{div} \mathbf{Q}^d \right] - B_\rho \rho^2 (\operatorname{div} \mathbf{w})^2. \end{aligned} \quad (55)$$

Далее, из закона сохранения массы имеем:

$$\begin{aligned} B_\rho \left(\frac{d\rho}{dt} \right)^2 &= B_\rho \rho^2 (\operatorname{div} \mathbf{u} - \operatorname{div} \mathbf{w})^2 = \\ &= B_\rho \rho^2 (\operatorname{div} \mathbf{w})^2 + B_\rho \rho^2 (\operatorname{div} \mathbf{u})^2 - \\ &\quad - \operatorname{div} (2B_\rho \rho^2 \mathbf{w} \operatorname{div} \mathbf{u}) + \mathbf{w} \cdot \nabla (2B_\rho \rho^2 \operatorname{div} \mathbf{u}). \end{aligned}$$

Выражая из этого соотношения величину $B_\rho \rho^2 (\operatorname{div} \mathbf{w})^2$ и подставляя результат в (55), получим:

$$\begin{aligned} \Delta_2 &= -B_\rho \left(\frac{d\rho}{dt} \right)^2 + B_\rho \rho^2 (\operatorname{div} \mathbf{u})^2 + \\ &\quad + \operatorname{div} [\mathbf{a} - \mathbf{P}^d \cdot \mathbf{u} - \tilde{p}\mathbf{u} - \rho\mathbf{u}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{w}) - \mathbf{Q}^d \cdot \mathbf{w} + \\ &\quad\quad + B_\rho \rho^2 (\operatorname{div} \mathbf{w})\mathbf{u} - 2B_\rho \rho^2 (\operatorname{div} \mathbf{u})\mathbf{w}] + \\ &\quad + \mathbf{w} \cdot [-\rho\mathbf{f} - \nabla \tilde{p} + \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} + \operatorname{div} \mathbf{Q}^d + \nabla (2B_\rho \rho^2 \operatorname{div} \mathbf{u})]. \end{aligned}$$

Выберем теперь:

- определяющее соотношение для \mathbf{w} :

$$\mathbf{w}_2 = \tau \frac{1}{\rho} \left[-\rho\mathbf{f} - \nabla \tilde{p} + \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} + \operatorname{div} \mathbf{Q}^d + \nabla (2B_\rho \rho^2 \operatorname{div} \mathbf{u}) \right];$$

- определяющее соотношение для \mathbf{a} :

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_2 &= \mathbf{P}^d \cdot \mathbf{u} + \tilde{p}\mathbf{u} + \rho\mathbf{u}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{w}) + \mathbf{Q}^d \cdot \mathbf{w} - \\ &\quad - B_\rho \rho^2 (\operatorname{div} \mathbf{w})\mathbf{u} + 2B_\rho \rho^2 (\operatorname{div} \mathbf{u})\mathbf{w}. \end{aligned}$$

Подставляя теперь эти соотношения в выражение для Δ_2 , получим:

$$\Delta_2 = -B_\rho \left(\frac{d\rho}{dt} \right)^2 + B_\rho \rho^2 (\operatorname{div} \mathbf{u})^2 + \frac{\rho}{\tau} \mathbf{w}_2^2. \quad (56)$$

Другими словами, для замыкания 1 имеем:

$$B_\rho \left(\frac{d\rho}{dt} \right)^2 + \Delta_2 \Big|_{\substack{\mathbf{a}=\mathbf{a}_1 \\ \mathbf{w}=\mathbf{w}_1}} = B_\rho \left(\frac{d\rho}{dt} \right)^2 + \frac{\rho}{\tau} \mathbf{w}_1^2,$$

а для замыкания 2:

$$B_\rho \left(\frac{d\rho}{dt} \right)^2 + \Delta_2 \Big|_{\substack{\mathbf{a}=\mathbf{a}_2 \\ \mathbf{w}=\mathbf{w}_2}} = B_\rho \rho^2 (\operatorname{div} \mathbf{u})^2 + \frac{\rho}{\tau} \mathbf{w}_2^2.$$

С учетом (56) неравенство (51) примет вид:

$$0 \leq \mathbf{L}_u^d : \mathbf{G} : \mathbf{L}_u^d + B_\rho \rho^2 (\operatorname{div} \mathbf{u})^2 + \sum_{\alpha=1}^{N-1} B_\alpha \left(\frac{dC_\alpha}{dt} \right)^2 + \\ + \sum_{\alpha=1}^{N-1} \nabla \mu_\alpha \cdot \mathbf{M}_\alpha \cdot \nabla \mu_\alpha + \nabla T \cdot \mathbf{K} \cdot \nabla T + \frac{\rho}{\tau} \mathbf{w}_2^2.$$

Так же как и в случае первого замыкания, можно показать, что для указанного выбора \mathbf{w} и \mathbf{a} энтропийное неравенство выполняется с диссипативной функцией:

$$\mathcal{D} := \rho \frac{ds}{dt} + \operatorname{div} \frac{\mathbf{q}}{T} - \frac{\rho r}{T} = \frac{1}{T} \mathbf{L}_u^d : \mathbf{G} : \mathbf{L}_u^d + \\ + \frac{1}{T} \left[B_\rho \rho^2 (\operatorname{div} \mathbf{u})^2 + \sum_{\alpha=1}^{N-1} B_\alpha \left(\frac{dC_\alpha}{dt} \right)^2 + \sum_{\alpha=1}^{N-1} \nabla \mu_\alpha \cdot \mathbf{M}_\alpha \cdot \nabla \mu_\alpha \right] + \\ + \frac{1}{T^2} \nabla T \cdot \mathbf{K} \cdot \nabla T + \frac{\rho}{T\tau} \mathbf{w}_2^2 \geq 0.$$

9 Определяющие соотношения

В этом разделе приведен полный набор определяющих соотношений рассматриваемой модели.

Свободная энергия Гельмгольца

Выберем свободную энергию Гельмгольца единицы массы в виде:

$$\Psi(\rho, \nabla \rho, C_\alpha, \nabla C_\alpha, T) = \Psi_0(\rho, C_\alpha, T) + \frac{\lambda}{2\rho} |\nabla \rho|^2 + \sum_{\alpha=1}^{N-1} \frac{\lambda_\alpha}{2} |\nabla C_\alpha|^2, \quad (57)$$

где далее будем считать, что

$$\lambda = \lambda(C_\alpha) \geq 0, \quad \lambda_\alpha = \text{const} \geq 0$$

— заданы. Такой вид свободной энергии типичен для течений рассматриваемого типа и удовлетворяет достаточным условиям выполнения неравенства (43).

Вид «локальной части» Ψ_0 определяется следующим образом:

$$\Psi_0 = \Psi_{sep} + \Psi_{mix}, \quad (58)$$

$$\Psi_{mix}(\rho, T) = \sum_{\alpha=1}^N C_{\alpha} \Psi_{\alpha}(\rho_{\alpha}, T)$$

— массовая плотность свободной энергии Гельмгольца, соответствующей однородной смеси N невзаимодействующих компонент. Слагаемое Ψ_{sep} отвечает за разделение фаз. Его конкретный вид выбирают по-разному.

Так, например, в работе [12] для случая $N = 2$:

$$\Psi_{sep} = A_{\psi} C_1^2 C_2^2 = A_{\psi} C^2 (1 - C)^2.$$

Здесь явно видно, что Ψ_{sep} имеет два локальных минимума в точках $C = 0$ и $C = 1$, и один локальный максимум при $C = 1/2$. Т.к. свободная энергия Гельмгольца убывает по мере приближения системы к состоянию равновесия, то положение $C = 1/2$ неустойчиво, а положения $C = 0$ и $C = 1$ устойчивы.

В этой же работе для $N \geq 3$ выбрано

$$\Psi_{sep} = \sum_{\beta < \alpha} A_{\psi}^{\alpha, \beta} C_{\alpha}^2 C_{\beta}^2 + \sum_{\alpha=1}^N l_{\alpha}(T) C_{\alpha}^2 (3 - 2C_{\alpha}),$$

где $A_{\psi}^{\alpha, \beta}$ — некоторые положительные константы, а $l_{\alpha}(T)$ — линейные функции температуры. Другие примеры задания вида свободной энергии можно найти, например, в работах [2, 12, 13, 14, 15].

Микронапряжения

С учетом общих определяющих соотношений для микронапряжений (45), из (57) имеем:

$$\boldsymbol{\xi} = \lambda \nabla \rho, \quad \boldsymbol{\xi}_{\alpha} = \lambda_{\alpha} \rho \nabla C_{\alpha}, \quad \alpha = \overline{1, N-1}. \quad (59)$$

Отсюда и из определения (34) следует, что:

$$\boldsymbol{Q} = \lambda \nabla \rho \otimes \nabla \rho + \rho \sum_{\alpha=1}^{N-1} \lambda_{\alpha} \nabla C_{\alpha} \otimes \nabla C_{\alpha}.$$

Таким образом, при указанном выборе вида свободной энергии Гельмгольца и определяющих соотношений для микронапряжений тензор \boldsymbol{Q} является симметричным, что является одним из достаточных условий выполнения неравенства (43).

След тензора \boldsymbol{Q} имеет вид:

$$\text{tr } \boldsymbol{Q} = \lambda |\nabla \rho|^2 + \rho \sum_{\alpha=1}^{N-1} \lambda_{\alpha} |\nabla C_{\alpha}|^2,$$

а его девиатор:

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}^d &= \mathbf{Q} - \frac{1}{3}(\text{tr } \mathbf{Q})\mathbf{I} = \\ &= \lambda \nabla \rho \otimes \nabla \rho + \rho \sum_{\alpha=1}^{N-1} \lambda_{\alpha} \nabla C_{\alpha} \otimes \nabla C_{\alpha} - \frac{1}{3} \left(\lambda |\nabla \rho|^2 + \rho \sum_{\alpha=1}^{N-1} \lambda_{\alpha} |\nabla C_{\alpha}|^2 \right). \end{aligned} \quad (60)$$

Обобщенный химический потенциал

Выражая μ_{α} из соотношения (47) и используя уравнение баланса микросил и микронапряжений (23), получим:

$$\mu_{\alpha} = \frac{\partial \Psi}{\partial C_{\alpha}} - \frac{1}{\rho} \text{div } \boldsymbol{\xi}_{\alpha} - \frac{\gamma_{\alpha}}{\rho} + B_{\alpha} \frac{1}{\rho} \frac{dC_{\alpha}}{dt}.$$

Отсюда, с учетом выражения для микронапряжений (59) и вида свободной энергии (57) имеем:

$$\mu_{\alpha} = \frac{\partial \Psi_0}{\partial C_{\alpha}} - \frac{1}{\rho} \text{div} (\lambda_{\alpha} \rho \nabla C_{\alpha}) + \frac{1}{2\rho} \frac{\partial \lambda}{\partial C_{\alpha}} |\nabla \rho|^2 - \frac{\gamma_{\alpha}}{\rho} + B_{\alpha} \frac{1}{\rho} \frac{dC_{\alpha}}{dt}.$$

Векторы плотности потока массы компонентов

Вектор \mathbf{h}_{α} имеет вид (48). Полагая

$$\mathbf{M}_{\alpha} = M_{\alpha} \mathbf{I}, \quad M_{\alpha} \geq 0,$$

получим

$$\mathbf{h}_{\alpha} = -M_{\alpha} \nabla \mu_{\alpha}.$$

Вектор плотности теплового потока

Вектор \mathbf{q} определяется соотношением (49). Полагая

$$\mathbf{K} = K \mathbf{I}, \quad K \geq 0,$$

получим

$$\mathbf{q} = -K \nabla T.$$

Тензор напряжений

Сначала получим выражение для \bar{p} . Для этого выразим его из соотношения (46) и используем закон сохранения массы (21) и уравнение баланса микросил и микронапряжений (24). Получим:

$$\bar{p} = \rho \text{div } \boldsymbol{\xi} - \rho^2 \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} - \frac{1}{3} \text{tr } \mathbf{Q} + \rho \gamma + B_{\rho} \rho^2 \text{div } \mathbf{u}_m.$$

Далее, с учетом выбранного вида свободной энергии (57), имеем:

$$\rho^2 \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} = \rho^2 \frac{\partial \Psi_0}{\partial \rho} - \frac{\lambda}{2} |\nabla \rho|^2.$$

Введем обозначение:

$$\zeta := \rho^2 B_\rho. \quad (61)$$

Величина ζ имеет размерность вязкости и, как будет видно из анализа выражения для тензора напряжений \mathbf{P} , является коэффициентом объемной (второй) вязкости.

Окончательно получим следующее выражение:

$$\bar{p} = \rho \operatorname{div} \boldsymbol{\xi} - \rho^2 \frac{\partial \Psi_0}{\partial \rho} + \frac{\lambda}{2} |\nabla \rho|^2 - \frac{1}{3} \operatorname{tr} \mathbf{Q} + \rho \gamma + \zeta \operatorname{div} \mathbf{u}_m. \quad (62)$$

Теперь рассмотрим тензор \mathbf{P}^d , определяемый соотношением (50). Положим в этом выражении

$$[\mathbf{G}]_{ijkl} = G_{ijkl} = 2\eta \delta_{ik} \delta_{jl},$$

где η — неотрицательная скалярная величина. Тогда непосредственной подстановкой можно убедиться, что в этом случае:

$$\mathbf{P}^d = 2\eta \mathbf{L}_u^d - \mathbf{Q}^d.$$

Отсюда видно, что η — коэффициент динамической вязкости.

Наконец, подставляя полученные соотношения в выражение (19) и (36) и явно учитывая вид параметров модели ($\boldsymbol{\xi}$, $\boldsymbol{\xi}_\alpha$, ...) при заданном виде (57) свободной энергии, после перегруппировки слагаемых получим:

$$\begin{aligned} \mathbf{P} = & [2\eta \mathbf{L}_u^d + \zeta (\operatorname{div} \mathbf{u}) \mathbf{I}] - \\ & - p \mathbf{I} + \\ & + \left[-\lambda \nabla \rho \otimes \nabla \rho + \left(\rho \operatorname{div} (\lambda \nabla \rho) + \frac{\lambda}{2} |\nabla \rho|^2 + \rho \gamma \right) \mathbf{I} \right] - \\ & - \rho \sum_{\alpha=1}^{N-1} \lambda_\alpha \nabla C_\alpha \otimes \nabla C_\alpha + \\ & + [\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{w} - \zeta (\operatorname{div} \mathbf{w}) \mathbf{I}], \end{aligned}$$

где в первой строке стоит

$$\mathbf{P}_{\text{NS}} := 2\eta \mathbf{L}_u^d + \zeta (\operatorname{div} \mathbf{u}) \mathbf{I}$$

— обычный тензор вязких напряжений Навье–Стокса, во второй строке —

$$p := \rho^2 \frac{\partial \Psi_0}{\partial \rho}$$

— термодинамическое давление, в третьей —

$$\mathbf{Q}_K := -\lambda \nabla \rho \otimes \nabla \rho + \left(\rho \operatorname{div} (\lambda \nabla \rho) + \frac{\lambda}{2} |\nabla \rho|^2 + \rho \gamma \right) \mathbf{I}$$

— тензор напряжений Кортвега, который связан с капиллярными силами на (диффузной) границе раздела двух фаз, состоящих из одного компонента, в четвертой —

$$\mathbf{Q}_C := -\rho \sum_{\alpha=1}^{N-1} \lambda_\alpha \nabla C_\alpha \otimes \nabla C_\alpha$$

— тензор капиллярных напряжений, который может быть связан с капиллярными силами на (диффузной) границе раздела фаз, состоящих из различных компонентов, в пятой —

$$\mathbf{P}_{\text{QHD}} := \rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{w} - \zeta (\operatorname{div} \mathbf{w}) \mathbf{I},$$

— дополнительное слагаемое в тензоре напряжений, связанное с отличием вектора плотности потока массы от импульса единицы объема.

Внутренняя энергия

Выражение для плотности внутренней энергии может быть получено из определения (28) свободной энергии Гельмгольца, выражения (44) для плотности энтропии и вида свободной энергии (57):

$$\begin{aligned} \varepsilon &= \Psi - T \frac{\partial \Psi}{\partial T} = \Psi - T \frac{\partial \Psi_0}{\partial T} = \\ &= \left(\Psi_0 - T \frac{\partial \Psi_0}{\partial T} \right) + \frac{\lambda}{2\rho} |\nabla \rho|^2 + \sum_{\alpha=1}^{N-1} \frac{\lambda_\alpha}{2} |\nabla C_\alpha|^2. \end{aligned}$$

Непосредственной проверкой можно показать, что различные замыкающие соотношения для векторов \mathbf{w} и \mathbf{a} совпадают,

$$\mathbf{w}_1 = \mathbf{w}_2, \quad \mathbf{a}_1 = \mathbf{a}_2,$$

если положить $\zeta = 0$.

Поскольку вопрос о выборе единственного способа замыкания пока открыт, далее будем рассматривать случай именно нулевой объемной вязкости.

Тогда имеем:

Выражение для вектора w

$$w = \tau \frac{1}{\rho} (-\rho f - \nabla \tilde{p} + \rho(u \cdot \nabla)u + \operatorname{div} Q^d).$$

При этом входящее в тензор напряжений «давление» \bar{p} в рассматриваемом случае нулевой объемной вязкости тождественно равно \tilde{p} :

$$\bar{p} \equiv \tilde{p} = \rho \operatorname{div}(\lambda \nabla \rho) - \rho^2 \frac{\partial \Psi_0}{\partial \rho} + \frac{\lambda}{2} |\nabla \rho|^2 - \frac{1}{3} \operatorname{tr} Q + \rho \gamma.$$

Выражение для вектора a

$$a = P^d \cdot u + \tilde{p}u + \rho u(u \cdot w) + Q^d \cdot w.$$

10 Основные уравнения

Общий вид законов сохранения в консервативной форме был сформулирован ранее в разделе 6.1. Приведем их здесь в конечном виде.

Закон сохранения массы компонентов

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho C_\alpha) + \operatorname{div}(\mathbf{j}_m C_\alpha + \mathbf{h}_\alpha) = m_\alpha, \quad \alpha = \overline{1, N-1},$$

где m_α — источник массы компонента α .

Закон сохранения массы

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j}_m = 0.$$

Закон сохранения импульса

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + \operatorname{div}(\mathbf{u}_m \otimes \rho u - P) = \rho f.$$

Закон сохранения энергии

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \operatorname{div}(\rho E \mathbf{u}_m) &= \mathbf{j}_m \cdot \mathbf{f} + \operatorname{div} \mathbf{a} - \operatorname{div} \mathbf{q} - \sum_{\alpha=1}^{N-1} \operatorname{div}(\mu_\alpha \mathbf{h}_\alpha) + \\ &+ \sum_{\alpha=1}^{N-1} m_\alpha \mu_\alpha + \sum_{\alpha=1}^{N-1} \left[\operatorname{div} \left(\frac{dC_\alpha}{dt} \boldsymbol{\xi}_\alpha \right) + \frac{dC_\alpha}{dt} \gamma_\alpha \right] + \left[\operatorname{div} \left(\frac{d\rho}{dt} \boldsymbol{\xi} \right) + \frac{d\rho}{dt} \gamma \right] + \rho r. \end{aligned}$$

Выражения для $\boldsymbol{\xi}$ и $\boldsymbol{\xi}_\alpha$ задаются определяющими соотношениями, приведенными в предыдущем разделе, а выражения для полных временных производных плотности и концентраций по времени следуют из законов сохранения в лагранжевой форме (20) и (21):

$$\frac{d\rho}{dt} := -\rho \operatorname{div} \mathbf{u}_m, \quad \frac{dC_\alpha}{dt} := \frac{1}{\rho} (m_\alpha - \operatorname{div} \mathbf{h}_\alpha), \quad \alpha = \overline{1, N-1}.$$

11 Замечания и заключение

Сделаем ряд замечаний, которые подчеркивают некоторые свойства построенной модели и до некоторой степени обосновывают ее корректность.

1. Применение процедуры Колмана-Нолла приводит к двум вариантам замыкания квазигидродинамической системы для описания движения многокомпонентной многофазной жидкости с учетом поверхностных эффектов на границе раздела фаз.

Для обоих замыканий выполняется закон неубывания энтропии и неравенство для свободной энергии. При этом определяющие соотношения для обеих моделей полностью совпадают, за исключением выражений для вектора \mathbf{w} и вектора плотности потока энергии за счет работы внутренних сил \mathbf{a} .

Уравнения, выражающие законы сохранения массы, импульса и энергии, совпадают с точностью до входящих в них выражений для векторов \mathbf{w} и \mathbf{a} . При этом для замыкания 1 определяющее соотношение для \mathbf{w} задает ее неявно. Соответствующее уравнение является следствием соотношений (52), (53), (54) и (61) и имеет вид:

$$\mathbf{w}_1 + \frac{\tau}{\rho} \nabla(\zeta \operatorname{div} \mathbf{w}_1) = \frac{\tau}{\rho} [-\rho \mathbf{f} - \nabla \tilde{p} + \rho(\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{u} + \operatorname{div} \mathbf{Q}^d],$$

где правая часть не зависит от \mathbf{w}_1 . Для замыкания 2 определяющее соотношение явно задает \mathbf{w} . Но при условии $\zeta = 0$ оба замыкания совпадают.

Все сказанное выше не специфично для рассматриваемого случая многокомпонентной модели. Возможность замыкания системы уравнения двумя способами появляется и в случае однофазного течения [8]. Случай ненулевой объемной вязкости, таким образом, требует отдельного исследования.

2. Если в построенных уравнениях и определяющих соотношениях положить $\tau = 0$, то получим $\mathbf{w} = 0$ и построенная модель будет совпадать с ранее опубликованными моделями типа «диффузной границы», в том числе общепринятыми (в частности, с моделью Навье–Стокса–Кортвега и моделью Навье–Стокса–Кана–Хилларда).

3. Если положить число компонент $N = 1$, объемную вязкость $\zeta = 0$ и исключить из модели эффекты, связанные с межфазным взаимодействием (то есть положить $\lambda = \lambda_\alpha = 0$), то получим ранее опубликованную «обычную» систему КГид уравнений.

Список литературы

- [1] M. E. Gurtin. Generalized Ginzburg-Landau and Cahn-Hilliard equations based on a microforce balance. // *Physica D: Nonlinear Phenomena* 92(3–4):178–192, 1996.
- [2] J. Liu. Thermodynamically consistent modeling and simulation of multiphase flows. PhD thesis. The University of Texas at Austin, 2014.
- [3] B. D. Coleman, W. Noll. The thermodynamics of elastic materials with heat conduction and viscosity. // *Archive for Rational Mechanics and Analysis* 13(1):167–178, 1963.
- [4] Ю. В. Шеретов. Динамика сплошных сред при пространственно-временном осреднении. М.-Ижевск: Регулярная и хаотическая динамика, 2009.
- [5] E. Fried, M. E. Gurtin. Continuum theory of thermally induced phase transitions based on an order parameter. // *Physica D: Nonlinear Phenomena* 3–4(68):326–343, 1993.
- [6] M. E. Gurtin, D. Polignone, J. Vinals. Two-phase binary fluids and immiscible fluids described by an order parameter // Tech. rep. 95-NA-001. Carnegie Mellon University, 1995.
- [7] A. Miranville, G. Schimperna. Global solution to a phase transition model based on a microforce balance. // *Journal of Evolution Equations* 5(2):253 – 276, May 2005.
- [8] В.А. Балашов, Е.Б. Савенков. Феноменологический вывод квази-гидродинамической системы уравнений с учетом объемной вязкости. // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2015. №68. 25 с. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2015-68>
- [9] К. Трусделл. Первоначальный курс рациональной механики сплошных сред. МИР, 1975.
- [10] M. E. Gurtin, E. Fried, L. Anand. The mechanics and thermodynamics of continua. Cambridge University Press, 2010.
- [11] C. Truesdell, W. Noll. *The Non-Linear Field Theories of Mechanics*. Springer, 1965.
- [12] H. Garcke, B. Nestler, B. Stoth. On anisotropic order parameter models for multi-phase systems and their sharp interface limits. // *Physica D Nonlinear Phenomena* 115:87–108, 1998.

- [13] J. Kim. Phase field computations for ternary fluid flows. // *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* pp. 4779–4788, 2007.
- [14] L. Cherfils, A. Miranville, S. Zelik. The Cahn-Hilliard equation with logarithmic potentials. // *Milan Journal of Mathematics* 79(2):561–596, 2011.
- [15] F. Boyer, C. Lapuerta, S. Minjeaud, B. Piar, M. Quintard. Cahn–Hilliard/Navier–Stokes model for the simulation of three-phase flows. // *Transport in Porous Media* 82(3):463–483, 2010.

Содержание

1	Введение	3
2	Основные идеи концепции «микросил»	5
3	Поток массы и массовая скорость	8
4	Модель компонентного состава	9
5	Законы сохранения в интегральной форме	10
6	Законы сохранения в дифференциальной форме	13
6.1	Законы сохранения в консервативной форме	13
6.2	Законы сохранения в лагранжевой форме	15
7	Диссипативное неравенство для свободной энергии	15
8	Процедура Колмана–Нолла	17
8.1	Замыкание I	24
8.2	Замыкание II	25
9	Определяющие соотношения	27
10	Основные уравнения	32
11	Замечания и заключение	33