

МОДЕЛИРОВАНИЕ ГИДРОДИНАМИКИ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СРЕД

**А.А. Долинский, академик НАН Украины
Б.Х. Драганов, доктор технических наук**

Приведены основы соотношения симметрии Онсагера-Казимира и принципы сопряжения термодинамических сил и потоков. Проанализированы закономерности гидродинамики многокомпонентных сред для ламинарных и турбулентных потоков.

Соотношения Онсагера-Казимира, принципы Кюри и Пригожина, энергия Гиббса, удельная плотность источника, конституальные соотношения, феноменологический метод, турбулентность.

Проблему гидродинамики многокомпонентных сред можно решать кинетическим или феноменологическим методами. Феноменологический метод, основанный на применении законов механики сплошной среды и неравновесной термодинамики к макроскопическому объему смеси, не связан с постулированием конкретной микроскопической модели взаимодействия частиц и применим для широкого класса сред.

Основываясь на положениях неравновесной термодинамики [1, 8], принципы взаимности Онсагера-Казимира могут сыграть существенную роль при моделировании реальных многоатомных газовых смесей. В этом отношении заслуживает внимание работа [4], в которой, одной из первых коэффициенты многокомпонентной диффузии определены как симметричные.

Цель исследований – приведение основ моделирования многокомпонентных ламинарных и турбулентных потоков методом неравновесной термодинамики.

Материалы и методика исследований. Прежде, чем применить формализм неравновесной термодинамики непрерывных сред к описанию процессов тепломассопереноса в потоке многокомпонентной смеси, приведем кратко суть тех основных постулатов, которые лежат в основе теории. Они могут быть практически использованы при термодинамическом анализе любого необратимого процесса (протекающего, в том числе, и в турбулизованном континууме).

В линейной неравновесной термодинамике в качестве определяющих соотношений, которые дополняют систему гидродинамических уравнений сохранения, применяются феноменологические соотношения необратимых процессов (соотношения Онсагера):

$$J_k = \sum_{l=1}^Q L_{kl} X_l, \quad (k=1,2,\dots,Q), \quad (1)$$

где Q – число независимых физических процессов: L_{kl} – матрица феноменологических (кинетических) коэффициентов, связывающая между собой потоки J_k и термодинамические силы X_l .

Для экстенсивных величин (таких как масса, энергия) существуют законы сохранения. Переносимые величины (такие как теплота) связаны с потоками в законах сохранения. Потоки и термодинамические силы в (1) являются, в общем случае, тензорными величинами любого ранга. Как было упомянуто выше, в рамках феноменологической теории явный вид кинетических коэффициентов в (1) не расшифровывается, однако их физический смысл может быть выяснен в молекулярно-кинетической теории (Ферцигер, Капер, [3]). Число отличных от нуля кинетических коэффициентов в (1) ограничивается принципом Кюри [1], согласно которому, в силу свойств симметрии рассматриваемой материальной среды, компоненты (здесь составляющие векторов вдоль осей координат) потоков будут зависеть не от всех компонентов термодинамических сил. Так, в частном случае изотропной системы (свойства которой в равновесном состоянии одинаковы во всех направлениях), процессы разной тензорной размерности не взаимодействуют друг с другом. Кроме того, при аксиоматическом подходе принимаются в качестве независимого постулата соотношения симметрии Онсагера-Казимира (принцип взаимности):

$$L_{kl}(\mathbf{B}, \Omega) = \varepsilon_k \varepsilon_l L_{lk}(-\mathbf{B}, -\Omega), \quad (2)$$

позволяющие свести до минимума число феноменологических коэффициентов в линейных соотношениях (1). Здесь B – магнитная индукция, Ω – угловая скорость вращения системы, с^{-1} , а $e_k = 1$ для четных (энергия, концентрация), $e_k = -1$ для нечетных (плотность импульса) макроскопических параметров (четных и нечетных функций скоростей частиц). Для изотропной невращающейся системы

$$L_{kl} = L_{lk}, \quad (3)$$

где L_{kl} – скалярные величины. Соотношения симметрии (3) могут считаться эмпирически устойчивой аксиомой, независимо от них доказательства в рамках статистической механики.

Для определения потоков и сопряженных им термодинамических сил используется обычно конкретное представление скорости производства (плотности источника) энтропии $\sigma_{(s)}$ внутри системы в рассматриваемом необратимом процессе в виде билинейной формы:

$$T\sigma_{(s)} = \sum_{k=1}^Q J_k X_k \geq 0, \quad (4)$$

причем, после того как определены потоки J_k , сопряженные им силы X_k находятся однозначно, как коэффициенты перед соответствующими потоками.

Результаты исследований. Рассмотрим газовую смесь, состоящую из N компонентов. Термогидродинамическим параметрам, которые

относятся к разным компонентам смеси, будем присваивать различные индексы, в качестве которых используются буквы греческого алфавита α, β . Макроскопически смесь будем рассматривать как один континуум с усложненными свойствами, характеризуемый системой переменных состояний, к которым в первую очередь можно отнести среднемассовую плотность $\rho(r, t)$, температуру $T(r, t)$, термодинамическое давление $p(r, t)$ и числовые плотности $n_\alpha(r, t)$ ($\alpha = 1, 2, \dots, N$) химических компонентов смеси. Переменные состояния являются функциями времени t и пространственных координат x, y, z в относительной системе координат, неподвижной относительно планеты.

Уравнение субстанционального баланса для любого определяющего параметра смеси $A(r, t)$ (т.е. параметра, характеризующего состояние сплошной среды и ее динамику, в частности, мгновенное состояние турбулизованной смеси), может быть записано в следующем общем виде:

$$\rho dA / dt = -J_{(A)j} + \sigma_{(A)}. \quad (5)$$

Здесь ρ – суммарная массовая плотность смеси; A – удельное (локальное) значение какой-либо скалярной величины (например, массы, энергии, энтропии и пр.); $J_{(A)j}$ – соотношение вектора субстанциональной плотности молекулярного потока параметра A (суммарная величина всех видов переноса признака A через единичную поверхность, включающая конвективную составляющую $\rho A V_j$, а также потоки, определяющие поверхностные воздействия); $\sigma_{(A)}$ – объемная плотность источника признака A (скорость возникновения ($\sigma_{(A)} > 0$) или уничтожения ($\sigma_{(A)} < 0$) величины A в единице объема и в единицу времени).

Уравнение эволюции удельной энтропии S в непрерывной системе имеет вид:

$$\rho dS / dt = J_{(S)j} + \sigma_{(S)}; \quad (\sigma_{(S)} \geq 0); \quad (6)$$

в котором $J_{(S)j}$ – составляющие вектора субстанциональной плотности потока энтропии, причем дивергенция $J_{(S)j}$ описывает обратимый теплообмен между рассматриваемой и внешней средой, а неравенство $\sigma_{(S)} \geq 0$ соответствует второму закону термодинамики, согласно которому энтропия замкнутой системы не может уменьшаться.

Явный вид уравнения (6) может быть получен с учетом балансовых уравнений для удельного объема, удельной внутренней энергии смеси из тождества Гиббса для этих величин, записанного вдоль траектории движения центра масс физического элементарного объема [5]:

$$TdS / dt = d\varepsilon / dt + pdv / dt - \sum_{\alpha=1}^N \mu_\alpha dZ_\alpha / dt. \quad (7)$$

Здесь μ_α – химический потенциал компоненты α , рассчитываемый на одну частицу вещества [3].

$$\mu_\alpha = h_\alpha - TS_\alpha = \varepsilon_\alpha + pv_\alpha - TS_\alpha, \quad (8)$$

ε_α , v_α , S_α – соответственно парциальная внутренняя энергия, парциальный объём и парциальная энтропия компоненты α . Из (8) вытекает используемое далее выражение для удельной свободной энергии Гиббса (удельного термодинамического потенциала):

$$G = \sum_{\alpha=1}^N Z_\alpha \mu_\alpha = \varepsilon + pv - TS = h - TS, \quad (9)$$

Следует также отметить, что гипотеза о локальном равновесии среды эквивалентна предположению о справедливости не только соотношений Гиббса, но и всех остальных термостатических соотношений для бесконечно малых областей неравновесных систем. Так, допускается наличие удельного термодинамического потенциала и применимость известного соотношения [1]:

$$dG = -SdT - vdp + \sum_{\beta=1}^N \mu_\beta dZ_\beta, \quad (10)$$

из которого с помощью (7) может быть получено имеющее фундаментальное значение для термодинамики многокомпонентных систем соотношение Гиббса – Дюгема [3]

$$\rho \sum_{\alpha=1}^N Z_\alpha d\mu_\alpha = -\rho SdT + dp. \quad (11)$$

Проанализируем потоки диффузии и тепла в развитом турбулентном потоке. В мелкомасштабной турбулентности, для которой, как правило, наблюдается тенденция к установлению локальной статистической изотропности, статистические свойства турбулентного течения не зависят от направления. Данный методический подход легко обобщается в случае неизотропной (крупномасштабной) турбулентности.

Для турбулентных потоков диффузии $J_{\alpha j}^T$ ($\alpha=1,2,\dots,N$) и тепла J_q^{T*} , а также для потока энтропии турбуликации $J_{(S_F)j}$, можно записать следующие кинематические конститутивные соотношения [2]:

$$J_q^{T*} = L_{00}^T X_{0j}^T - \sum_{\beta=1}^N L_{0\beta}^T X_{\beta j}^{T*}; \quad (12)$$

$$J_{\alpha j}^T = L_{\alpha 0}^T X_{0j}^T - \sum_{\beta=1}^N L_{\alpha\beta}^T X_{\beta j}^{T*}, \quad (\alpha=1,2,\dots,N); \quad (13)$$

$$J_{(S_F)j} = -L_{FF} T_{F,j}, \quad (14)$$

причем скалярные феноменологические коэффициенты L^T , зависящие от осредненных параметров состояния $\bar{\rho}$, \bar{T} , Z_α ($\alpha=1,2,\dots,N$) и параметра \bar{e} , характеризующего физическую природу турбулентной среды, удовлетворяют условиям симметрии Онсагера-Казимира.

$$\sum_{\alpha=1}^N M_\alpha L_{\alpha 0}^\Sigma = 0, \quad \sum_{\alpha=1}^N M_\alpha L_{\alpha\beta}^\Sigma = 0, \quad (\beta=1,2,\dots,N), \quad (15)$$

где M_α – молекулярная масса частицы α .

Выводы

Феноменологический подход позволяет промоделировать как ламинарные, так и осредненные турбулентные режимы течений в атмосфере. В рамках феноменологической теории турбулентности многокомпонентного химически активного континуума рассмотрен термодинамический подход к замыканию гидродинамических уравнений осредненного движения на уровне моделей, который позволяет найти более общие выражения для турбулентных потоков в многокомпонентной среде, чем те, которые выводятся с использованием понятия пути смешения.

Список литературы

1. Де Грот С. Неравновесная термодинамика / С. де Грот, П. Мазур. – М.: Мир, 1964. – 456 с.
2. Колесниченко А.В. Турбулентность многокомпонентных сред / А.В. Колесниченко, М. А. Макаров. – М.: МАИК «Наука», 1998. – 336 с.
3. Пригожин И. Химическая термодинамика / И. Пригожин, Р. Дефей. – Новосибирск: Наука, 1966. – 506 с.
4. Ферцигер Дж. Математическая теория процессов переноса в газах / Дж. Ферцигер, Г. Капер – М.: Мир, 1976. – 524 с.
5. Gills J.W. On the equilibrium of heterogeneous Substances. Trans Conn/ Acad. Sci., III, 1878. – С. 343 – 524.
6. Mason E.A. The Onsager reciprocal relations/ Experimental evidence // In: Foundations of continuum thermodynamics. – London and Basingstoke: Mac Millan. – 1974.
7. Miller D. G. Onsager relations. Experimental evidence // In: Foundations of continuum thermodynamics. – London and Basingstoke: Mac Millan. – 1974.
8. Prigogine I. Introduction to Thermodynamics in Irreversible Processes. – N. Y. – John Wiley, 1967.

Наведено основи співвідношення симетрії Онсагера-Казимира і принципи сполучення термодинамічних сил і потоків. Проаналізовано закономірності гідродинаміки багатоконпонентних середовищ для ламінарних і турбулентних потоків.

Співвідношення Онсагера-Казимира, принципи Кюрі і Пригожина, енергія Гіббса, питома щільність джерела, конституальні співвідношення, феноменологічний метод, турбулентність.

The foundations of the symmetry relations Onsager-Casimir and principles pairing thermodynamic forces and fluxes. Analyzed patterns of hydrodynamics of multicomponent media for laminar and turbulent flows.

Casimir-Onsager relations, principles Curie and Prigogine, Gibbs energy, the specific density of the source, constitualy relations, phenomenological method, turbulence.