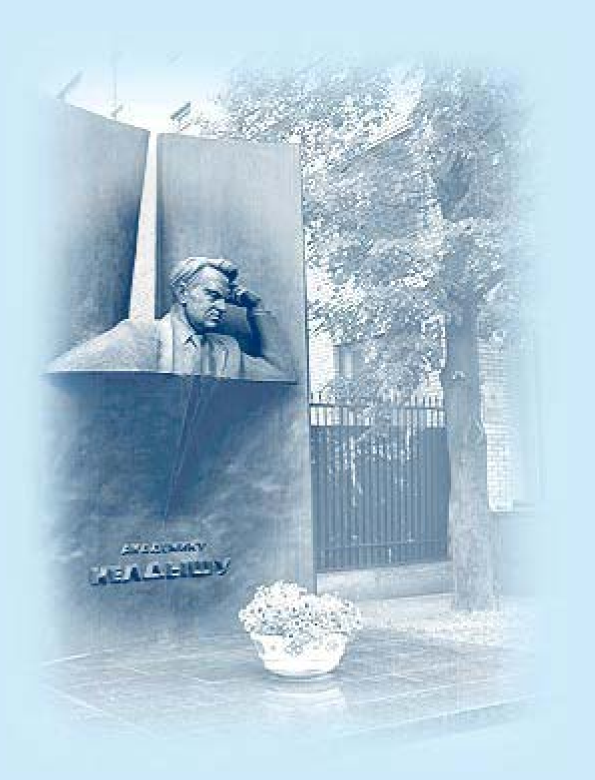
ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 96 за 2020 г.



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

В.А. Балашов, Е.Б. Савенков

Регуляризованная модель типа фазового поля для описания динамики системы «жидкость-твердое тело»

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Балашов В.А., Савенков Е.Б. Регуляризованная модель типа фазового поля для описания динамики системы «жидкость-твердое тело» // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2020. № 96. 29 с.
https://doi.org/10.20948/prepr-2020-96
https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2020-96

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

В.А. Балашов, Е.Б. Савенков

Регуляризованная модель типа фазового поля для описания динамики системы «жидкость–твердое тело»

Москва, 2020

В.А. Балашов[1], *Е.Б. Савенков*[1]. Регуляризованная модель типа фазового поля для описания динамики системы «жидкость–твердое тело»

Аннотация. Представленная работа посвящена разработке математической модели типа фазового поля (диффузной границы) для описания совместной динамики системы «жидкость–твердое тело». Основные балансовые соотношения формулируются в эйлеровой постановке. С помощью процедуры Колмана–Нолла выведены ограничения на вид определяющих соотношений на основе второго закона термодинамики. Отличительной особенностью модели является ее предварительная квазигидродинамическая регуляризация.

Ключевые слова: квазигидродинамическая регуляризация, многофазные течения, диффузная граница, модели типа фазового поля

V.A. Balashov, E.B. Savenkov. Regularized phase-field model for description of dynamics of “solid–fluid” system

Abstract. The presented work is devoted to the development of a mathematical model of the phase field type (with diffuse interface) for description of the dynamics of the“solid–fluid” system. The main balance relations are formulated using Euler description. Using the Coleman–Noll procedure, constraints are derived in the form of constitutive relations based on the second law of thermodynamics. A distinctive feature of the model is its preliminary quasi-hydrodynamic regularization.

Key words and phrases: quasi-hydrodynamic regularization, multiphase flows, diffuse interface, phase field models

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект № 19-11-00169.

[1]ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, 125047, Москва, Миусская пл., 4

1 Введение

Во многих содержательных постановках задач гидродинамики считается, что область течения ограничена фиксированной недеформируемой границей, которая описывает наличие твердой стенки, являющейся поверхностью твердого тела. Деформацией и перемещениями точек тела в этом случае обычно пренебрегают.

Такое приближение достаточно распространено, однако в ряде случаев оно является неудолетворительным. Примерами подобных задач являются задачи аэроупругости, когда необходимо описывать течение жидкости или газа в окрестности упругой конструкции, способной испытывать значительные деформации под действием действующих на нее гидродинамических сил со стороны жидкости. Это приводит к необходимости решения связанных задач гидродинамики и теории упругости (в англоязычной литературе — fluid-structure interaction, FSI).

Указанный класс постановок можно считать частным случаем общей задачи описания динамики многофазной среды, в которой фазы описываются системой определяющих соотношений типичных как для жидкости, так и для твердого тела.

Известно множество постановок таких задач и методов их решения. Большинство из них описывают системы указанного вида как систему из двух групп уравнений (гидродинамики и, например, теории упругости), связанных нужной системой условий согласования на границе раздела фаз. Методы решения указанных задач разнятся в зависимости от конкретной области приложений.

Так, в случае решения задач аэроупругости часто используются лагранжевы или эйлерово-лагранжевы способы описания динамики системы. Такие методы демонстрируют хорошую эффективность в том случае, если (i) число «упругих» областей не слишком велико; (ii) упругие области, испытывая, возможно, значительные относительные деформации, остаются практически неподвижными как твердые тела (перемещения их центра масс малы).

В противном случае практическая реализация и применение алгоритмов указанного класса сталкивается со значительными техническими сложностями, связанными с перестройкой расчетной сетки в случае «очень больших» перемещений и/или деформаций и проблемой переинтерполяции сеточных полей между ними.

По этой причине представляет интерес разработка полностью эйлеровых подходов, цель которых — единообразное и однородное описание динамики многофазной среды с фазами, обладающими как «жидкой», так «упругой» реологиями с разрешением межфазной границы и учетом соответствующих сил.

Типичным приложением такого подхода является описание динамики дисперсной среды, в которой частицы дисперсной фазы могут быть как жидкими (эмульсия), так и твердыми (суспензия).

Разработке такой математической модели посвящена настоящая работа. Основным назначением предлагаемой модели является анализ многофазных течений с разрешением динамики границ раздела фаз при моделировании течений на микроуровне.

Отметим, что область задач микрогидродинамики — естественная для применения таких моделей. Однако сами модели могут применяться и для анализа других задач, в частности, тех же самых задач аэро- и гидроупругости.

Эйлерово описание сплошной среды в задачах взаимодействия жидкости с твердыми телами используется, например, в работах [1–7]. В частности, в [1,2] предлагается математическая модель типа диффузной границы. Такие модели предполагают наличие специального поля параметра порядка (или даже нескольких параметров порядка), которое играет роль «индикатора» фазы. Параметры порядка могут быть как искусственными, так и физически обоснованными (например, концентрация или плотность). При этом межфазная граница представляется тонким слоем конечной толщины, в котором эти параметры порядка изменяются «быстро», но гладко. Таким образом, граница имеет «диффузное» представление. Вместе с параметрами порядка могут изменяться и свойства среды.

Недостатком используемой в [2] модели диффузного представления межфазной границы является постепенное увеличение ее ширины. Поэтому такие модели пригодны для описания достаточно быстрых процессов. Этой особенности лишены модели типа фазового поля, которые могут рассматриваться как частный случай моделей с диффузной границей. В них свободная энергия Гельмгольца (или другой термодинамический потенциал) для смеси является невыпуклой функцией параметров порядка и зависит от их градиента (поэтому такие модели также называют слабо-нелокальными или градиентными). Невыпуклая зависимость обеспечивает разделение фаз и, грубо говоря, «стремится» сделать межфазную границу как можно более узкой. Тогда как градиентное слагаемое «стремится» увеличить толщину межфазной границы, играя в некотором смысле регуляризующую роль, не давая границе стать бесконечно тонкой. Подробнее о методах фазового поля см., например, [8–10]. Более того, такие свойства свободной энергии дают возможность учитывать энергию, сосредоточенную в межфазном слое («поверхностную» с точки зрения метода фазового поля). В частном случае двухфазной системы это соответствует обычному поверхностному (межфазному) натяжению. Среди работ, использующих модели фазового поля для решения задач взаимодействия жидкости с подвижным (деформируемым) твердым телом, отметим [4, 5, 11].

Настоящая работа посвящена построению математической модели, описывающей динамику многофазной системы, в которой различные фазы могут иметь как жидкую, так и твердую реологию. Формально построенная математическая модель описывает такую систему, как многокомпонентную смесь. Для построения указанной модели используется метод фазового поля, в котором в качестве параметров порядка выступают массовые плотности компонентов смеси. Ввиду выбора параметров порядка и описанных выше особенностей метода фазового поля модель обеспечивает существование пространственных подобластей, занятых смесью практически однородного состава. Эти области и интерпретируются в настоящей работе как отдельные фазы. Взвешивание свойств смеси по параметрам порядка позволяет учесть различную реологию отдельных фаз.

Для описания кинематических процессов, связанных с эволюцией параметра порядка, используется концепция микросил и микронапряжений [14–17]. В ее основе лежит предположение о том, что эволюция параметра порядка сопровождается работой и есть «силы» (в обобщенном смысле), совершающие данную работу. В качестве этих сил и выступают микросилы. При этом постулируется выполнение соответствующих балансовых соотношений, связывающих микросилы и микронапряжения, а также наличие некоторых дополнительных слагаемых в уравнении энергии, отвечающих за их работу (см. ниже). Концепция микросил и микронапряжений успешно применяется при построении различных моделей механики сплошной среды [18–20, 31, 32].

Для описания напряженного состояния и деформаций твердой фазы мы будем предполагать, что свободная энергия зависит от правого тензора деформации Коши–Грина, который, в свою очередь, определяется через тензор дисторсии. Для определения дисторсии мы будем использовать уравнение динамической совместности поля дисторсии и поля массовой скорости [22, 39], которое следует из непрерывности движения среды (см. [21, 22, 26, 39]). Такой подход к определению тензора дисторсии при эйлеровом описании движения смеси оказывается значительно удобнее, чем традиционный, в котором используется информация о положении материальных частиц в любой момент времени (он удобнее при использовании лагранжевых координат).

Особенностью представленной математической модели является то, что массовая плотность потока смеси в общем случае отличается от среднего импульса единицы объема. Заметим, что равенство не исключается, *обобщая* стандартную гипотезу о равенстве плотности потока массы и среднего импульса. Это предположение лежит в основе так называемой квазигидродинамической регуляризации моделей механики сплошной среды. Оно приводит к возникновению дополнительных малых слагаемых в исходных уравнениях, имеющих диссипативный характер. Таким образом, регуляризованные модели динамики вязкой жидкости, магнитной гидродинамики, мелкой воды и др. успешно применялись ранее [12,13,34]. Дополнительные регуляризующие слагаемые улучшают (а в некоторых случаях обеспечивают) свойство численной устойчивости явных разностных алгоритмов, в которых пространственные производные аппроксимированы центральными разностями. Похожие модели регуляризации предлагались также в работах [23, 24].

При определении вида определяющих соотношений в настоящей работе используется стандартная процедура Колмана–Нолла, основанная на том, что любые допустимые термодинамические процессы (то есть решения системы исходных балансовых соотношений) должны удовлетворять второму закону термодинамики.

2 Обозначения

Будем рассматривать динамику среды в пространственной области $\Omega \subset \mathbb{R}^3$, с кусочно гладкой границей $\partial\Omega$. Зададим декартову систему координат $Ox_1x_2x_3$, $\boldsymbol{x} := (x_1, x_2, x_3)$ с базисными векторами $\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_3$.

Векторы обозначаются строчными буквами жирным шрифтом: $\boldsymbol{u}$, $\boldsymbol{a}$, ...; тензоры второго ранга — прописными буквами жирным прямым шрифтом: $\mathbf{F}$, $\mathbf{\Pi}$, ...; тензоры четвертого ранга — прописными буквами жирным шрифтом с «крышечкой»: $\hat{\mathbf{G}}$, ...; скалярные величины — стандартным шрифтом: F_{ij}, A, u_k, φ, ... Псевдотензор Леви-Чивиты, имеющий третий ранг, обозначим $\epsilon := \epsilon_{ijk}\, \boldsymbol{e}_i \otimes \boldsymbol{e}_j \otimes \boldsymbol{e}_k$, где ϵ_{ijk} — символы Леви-Чивиты. Здесь и далее, если не сказано противное, по нижним индексам i, j, k подразумевается суммирование от 1 до 3. Символ «$\otimes$» соответствует тензорному (диадному) произведению. Равенство по определению обозначается символом «:=».

В дальнейшем мы будем считать, что по определению

$$
\begin{array}{rrl}
\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b} := a_i b_i, & \nabla\varphi := (\partial_i \varphi)\, \boldsymbol{e}_i, & \mathbf{A} \cdot \boldsymbol{u} \equiv \mathbf{A}\boldsymbol{u} := A_{ij} u_j\, \boldsymbol{e}_i, \\
\mathbf{A} : \mathbf{B} := A_{ij} B_{ij}, & \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} := A_{ik} B_{kj} \boldsymbol{e}_i \otimes \boldsymbol{e}_j, & \boldsymbol{u} \cdot \mathbf{A} := u_i A_{ij}\, \boldsymbol{e}_j, \\
\mathbf{A} : \epsilon := A_{ij} \epsilon_{ijk} \boldsymbol{e}_k, & \operatorname{sym} \mathbf{A} := \frac{1}{2}(\mathbf{A} + \mathbf{A}^{\mathrm{T}}), & \boldsymbol{v} \times \boldsymbol{u} := \epsilon_{ijk} v_i u_j\, \boldsymbol{e}_k, \\
\epsilon : \mathbf{A} := \epsilon_{ijk} A_{jk} \boldsymbol{e}_i, & \operatorname{skw} \mathbf{A} := \frac{1}{2}(\mathbf{A} - \mathbf{A}^{\mathrm{T}}), & \operatorname{div} \mathbf{A} \equiv \nabla \cdot \mathbf{A} := (\partial_i A_{ij})\, \boldsymbol{e}_j, \\
\mathbf{A}^{\mathrm{T}} := A_{ji} \boldsymbol{e}_i \otimes \boldsymbol{e}_j, & \det \mathbf{A} := \epsilon_{ijk} A_{i1} A_{j2} A_{k3}, & \boldsymbol{v} \times \mathbf{A} := \epsilon_{ijk} v_i A_{jm}\, \boldsymbol{e}_k \otimes \boldsymbol{e}_m, \\
|\boldsymbol{a}|^2 := \boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{a}, & \mathbf{A}_0 := \mathbf{A} - \frac{1}{3}(\operatorname{tr} \mathbf{A})\mathbf{I}, & \mathbf{A} \times \boldsymbol{v} := \epsilon_{mik} A_{jm} v_i\, \boldsymbol{e}_j \otimes \boldsymbol{e}_k, \\
\operatorname{tr} \mathbf{A} := \mathbf{A} : \mathbf{I} \equiv A_{ii}, & \nabla \otimes \boldsymbol{u} := (\partial_i u_j)\, \boldsymbol{e}_i \otimes \boldsymbol{e}_j. &
\end{array}
$$

Здесь $\mathbf{I} := \delta_{ij}\, \boldsymbol{e}_i \otimes \boldsymbol{e}_j$ — единичный тензор второго ранга, δ_{ij} — символ Кронекера, $\partial_i := \partial/\partial x_i$ — частная производная по x_i. Обратим внимание, что дивергенция тензора берется по первому индексу. Первый, второй и третий *главные* инварианты произвольного тензора $\mathbf{A}$ второго ранга определяются как

$$\mathrm{I}_1(\mathbf{A}) := \operatorname{tr}\mathbf{A}, \quad \mathrm{I}_2(\mathbf{A}) := \tfrac{1}{2}\big[\mathrm{I}_1^2(\mathbf{A}) - \mathrm{I}_1(\mathbf{A}^2)\big], \quad \mathrm{I}_3(\mathbf{A}) := \det\mathbf{A}.$$

Также нам понадобятся следующие тождества [21, 39]

$$\operatorname{div}(\mathbf{A}\cdot\boldsymbol{v}) = \boldsymbol{v}\cdot\operatorname{div}\mathbf{A} + \mathbf{A} : (\nabla\otimes\boldsymbol{v}). \tag{2.1}$$

Полная (субстанциональная, лагранжева, материальная) производная по времени t величины f, которая может быть тензором любого ранга, обозначается df/dt либо точкой: $\dot{f}$, $(f)^{\bullet}$; частная производная по времени t обозначается $\partial f/\partial t$ или $\partial_t f$.

3 Математическая модель

3.1 Концепция микросил и микронапряжений

Для описания кинематических процессов, связанных с эволюцией параметра порядка, в настоящей работе используется концепция микросил и микронапряжений [14–17]. В основе этой концепции лежит следующее предположение: фундаментальные физические законы, определяющие эволюцию энергии жидкости, должны учитывать работу, связанную с каждым кинематическим процессом. Поэтому предполагается, что (i) эволюция параметра порядка сопровождается соответствующей работой; (ii) есть силы (в обобщенном термодинамическом смысле), совершающие указанную работу: (векторное) поле внутренних микронапряжений $\boldsymbol{\xi}$, (скалярное) поле внутренних микросил π, (скалярное) поле внешних микросил γ. Выражения для мощности микронапряжений и микросил, затрачиваемой на изменение значения параметра порядка φ, имеют вид

$$\int\limits_{\partial V(t)} \dot{\varphi}\,\boldsymbol{\xi}\cdot\boldsymbol{n}\,d\sigma, \quad \int\limits_{V(t)} \pi\dot{\varphi}\,dV, \quad \int\limits_{V(t)} \gamma\dot{\varphi}\,dV,$$

где dV — элемент объема, $d\sigma$ — элемент площади поверхности.

Для введенной системы микросил и микронапряжений *постулируется* выполнение следующего балансового соотношения

$$\int\limits_{\partial V(t)} \boldsymbol{\xi}\cdot\boldsymbol{n}\,d\sigma + \int\limits_{V(t)} \pi\,dV + \int\limits_{V(t)} \gamma\,dV = 0. \tag{3.2}$$

Здесь $\boldsymbol{n}$ — внешняя единичная нормаль к границе ∂V произвольного материального объема $V(t)$. Также постулируется, что свободная энергия материального объема V растет со скоростью, не превышающей мощность всех сил, внешних по отношению к V,

$$\frac{d}{dt}\int\limits_{V(t)} \psi\rho\, dV \leqslant \int\limits_{\partial V(t)} \dot{\varphi}\,\boldsymbol{\xi}\cdot\boldsymbol{n}\, d\sigma + \int\limits_{V(t)} \dot{\varphi}\gamma\, dV. \tag{3.3}$$

Здесь ψ — массовая плотность свободной энергии Гельмгольца. Отметим, что в этом выражении не присутствуют внутренние микросилы. Более подробное изложение этого вопроса представлено в [14, 17]. В (3.3) предполагается, что в среде не происходят никакие процессы, кроме как связанные с наличием введенных микросил и микронапряжений. Для более сложных процессов, в частности рассматриваемых в настоящей работе, в правой части (3.3) должны присутствовать слагаемые, отвечающие за работу других сил, действующих в системе (внешние силы, напряжения в жидкости и т.д.).

3.2 Массовая скорость

Пусть $\mathring{\boldsymbol{x}}$ — координаты материальной частицы среды в отсчетной конфигурации (например, при $t = 0$) относительно некоторой (лабораторной) неподвижной системы координат; $\boldsymbol{x}$ — координаты частицы в актуальной конфигурации. Движение среды задается отображением $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{\chi}(\mathring{\boldsymbol{x}}, t)$, которое предполагается непрерывным, обратное к которому также непрерывно. Массовую скорость $\boldsymbol{u}_m$ материальной частицы $\mathring{\boldsymbol{x}}$ в момент времени t определим согласно

$$\boldsymbol{u}_m := \left.\frac{\partial \boldsymbol{x}(\mathring{\boldsymbol{x}}, t)}{\partial t}\right|_{\mathring{\boldsymbol{x}}}, \tag{3.4}$$

где $\partial(\cdot)/\partial t|_{\mathring{\boldsymbol{x}}} \equiv d(\cdot)/dt$ — полная (материальная) производная по времени t.

Из (3.4) и существования $\boldsymbol{\chi}^{-1}(\boldsymbol{x}, t)$ следует, что материальная производная связана с частной $\partial(\cdot)/\partial t|_{\boldsymbol{x}} \equiv \partial(\cdot)/\partial t$ по формуле

$$\dot{(\cdot)} \equiv \frac{d(\cdot)}{dt} = \frac{\partial(\cdot)}{\partial t} + (\boldsymbol{u}_m \cdot \nabla)(\cdot). \tag{3.5}$$

Таким образом, материальная (лагранжева) частица среды движется вдоль интегральной линии уравнения $d\boldsymbol{x}/dt = \boldsymbol{u}_m$ с начальным условием $\boldsymbol{x}(0) = \mathring{\boldsymbol{x}}$.

3.3 Эволюция поля дисторсии

Для определения напряженно-деформированного состояния твердой фазы мы будем использовать правый тензор деформации Коши–Грина, который, в свою очередь, определяется через тензор дисторсии (градиента деформации) $\mathbf{F}$. Традиционно тензор градиента деформации вводится как якобиан отображения движения:

$$\mathbf{F} := (\mathring{\nabla} \otimes \boldsymbol{\chi})^{\mathrm{T}}. \tag{3.6}$$

Рассмотрим полную производную от компонентов тензора $\mathbf{F}$:

$$\dot{F}_{kl} = \frac{d}{dt}\frac{\partial \chi_k}{\partial \mathring{x}_l} = \frac{\partial \dot{\chi}_k}{\partial \mathring{x}_l} = \frac{\partial (u_m)_k}{\partial \mathring{x}_l} = \frac{\partial (u_m)_k}{\partial x_i}\frac{\partial x_i}{\partial \mathring{x}_l} = \frac{\partial (u_m)_k}{\partial x_i} F_{il} = L_{ki} F_{il},$$

где L_{ki} — компоненты градиента массовой скорости $\mathbf{L} := (\nabla \otimes \boldsymbol{u}_m)^{\mathrm{T}}$. Таким образом, получаем равенство

$$\dot{\mathbf{F}} = \mathbf{L} \cdot \mathbf{F}, \tag{3.7}$$

которое описывает эволюцию поля дисторсии и представляет собой условие совместности полей дисторсии и массовой скорости [21, 22].

Важно подчеркнуть, что равенство (3.7) является следствием определения (3.6). Однако в дальнейшем *мы не будем пользоваться этим определением*: мы будем рассматривать (3.7) как самостоятельное *уравнение*, которое постулируется, а тензор дисторсии $\mathbf{F}$ будем определять как *решение* этого уравнения (дополненного соответствующими начальными и граничными условиями согласно конкретной задаче). Таким образом, далее величина $\mathbf{F}$ считается одной из первичных и независимых характеристик среды наравне с другими первичными переменными (такими как плотности компонентов, скорость и др. (см. ниже)). Аналогичные рассуждения применяются и в работе [7].

Замечание 1. *Пусть ρ — полная плотность материальной частицы, $\mathring{\rho}$ — плотность материальной частицы в начальный момент времени, $J := \det \mathbf{F}$. Если используется определение* (3.6)*, то равенство $\mathring{\rho} = \rho J$ следует из интегрального закона сохранения полной массы и непрерывности и взаимнооднозначности $\boldsymbol{\chi}$ и фактически является определением ρ (в настоящей работе ρ определена по-другому, см. следующий раздел). В настоящей же работе мы определяем $\mathbf{F}$ как решение уравнения* (3.7)*. На основе этого можно показать, что равенство $\mathring{\rho} = \rho J$ следует из уравнений* (3.7) *и баланса полной массы (который следует из постулируемых ниже балансов масс компонентов) (см. ниже замечание 2). Поэтому в рассматриваемом случае равенство $\mathring{\rho} = \rho J$ фактически является уравнением и не противоречит тому, что $\mathbf{F}$ и ρ априорно являются независимыми (см. также [7]).*

3.4 Основные балансовые соотношения

Будем считать, что смесь состоит из N компонентов. Пусть в объеме пространства dV содержится масса смеси dm, причем

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

где dm_α — масса компонента с номером $\alpha = 1, \dots, N$.

Плотность смеси определим как $\rho := dm/dV$. Введем плотность компонента $\rho_\alpha := dm_\alpha/dV$. Выполнено равенство

$$\rho = \sum_{\alpha=1}^{N} \rho_\alpha. \tag{3.8}$$

Постулируем выполнение следующих локальных законов сохранения для материальной частицы:

$$\dot{\mathbf{F}} \cdot \mathbf{F}^{-1} = \mathbf{L}, \tag{3.9}$$

$$\dot{\rho}_\alpha + \rho_\alpha \operatorname{div} \boldsymbol{u}_m = -\operatorname{div} \boldsymbol{h}_\alpha + m_\alpha, \tag{3.10}$$

$$\rho \dot{\boldsymbol{u}} = \operatorname{div} \boldsymbol{\Pi}^* + \rho \boldsymbol{f}, \tag{3.11}$$

$$\operatorname{div} \boldsymbol{\xi}_\alpha + \pi_\alpha + \gamma_\alpha = 0, \tag{3.12}$$

$$\begin{aligned} \rho \dot{\varepsilon}_{\text{tot}} = \quad & \rho \boldsymbol{u}_m \cdot \boldsymbol{f} + \operatorname{div}(\boldsymbol{a} - \boldsymbol{q} - \hat{\mu}_\alpha \boldsymbol{h}_\alpha) \\ & + \rho r + \operatorname{div}\left(\dot{\rho}_\alpha \boldsymbol{\xi}_\alpha\right) + \dot{\rho}_\alpha \gamma_\alpha + \hat{\mu}_\alpha m_\alpha. \end{aligned} \tag{3.13}$$

Здесь и далее по повторяющемуся индексу α подразумевается суммирование от 1 до N. Уравнение (3.9) следует из (3.7).

Далее, уравнение (3.10) описывает закон сохранения массы компонента. Величины $\boldsymbol{h}_\alpha$ и m_α — вектор плотности потока массы компонента α и объемная плотность источников массы компонента α. Будем считать, что внешних потоков и источников массы нет:

$$\sum_{\alpha=1}^{N} \boldsymbol{h}_\alpha = \mathbf{0}, \qquad \sum_{\alpha=1}^{N} m_\alpha = 0. \tag{3.14}$$

Суммируя (3.10) и учитывая свойства (3.8) и (3.14), получим закон сохранения полной массы смеси

$$\dot{\rho} = -\rho \operatorname{div} \boldsymbol{u}_m. \tag{3.15}$$

Замечание 2. *Покажем, что способ определения* $\mathbf{F}$ *как решения уравнения* (3.9) *приводит к равенству* $\rho J = \mathring{\rho}$ *(см. также замечание 1). Применяя формулу для производной определителя (см., например, [21, sec. 3.4]) и уравнение* (3.9), *имеем*

$$\dot{J} = \frac{\partial(\det \mathbf{F})}{\partial \mathbf{F}} : \dot{\mathbf{F}} = (\det \mathbf{F})\mathbf{F}^{-\mathrm{T}} : \dot{\mathbf{F}} = J \operatorname{tr}(\dot{\mathbf{F}} \cdot \mathbf{F}^{-1}) = J \operatorname{tr} \mathbf{L},$$

откуда с учетом тождества $\operatorname{tr} \mathbf{L} \equiv \operatorname{div} \boldsymbol{u_m}$ *следует равенство*

$$\dot{J} = J \operatorname{div} \boldsymbol{u}_m. \tag{3.16}$$

Умножая (3.16) *на* ρ, *а* (3.15) *на* J, *и складывая результаты, получим* $(\rho J)^{\bullet} = 0$. *Поэтому* $\rho J = \mathring{\rho}$, *если* $J|_{t=0} = 1$.

Баланс микросил и микронапряжений описывается уравнениями (3.12). В качестве параметров порядка в настоящей работе выбраны плотности компонентов ρ_α. Поэтому для каждого компонента естественно ввести свою группу микросил и микронапряжений $\boldsymbol{\xi}_\alpha, \pi_\alpha, \gamma_\alpha$. Уравнения (3.12) следуют непосредственно из интегрального соотношения (3.2) при формальной замене $\boldsymbol{\xi} \to \boldsymbol{\xi}_\alpha$, $\pi \to \pi_\alpha$, $\gamma \to \gamma_\alpha$.

Уравнение (3.13) соответствует закону сохранения полной энергии системы, где $\varepsilon_{\text{tot}} := \varepsilon + |\boldsymbol{u}|^2/2$ — полная энергия, ε — внутренняя энергия, $\boldsymbol{a}$ — вектор, связанный с плотностью потока энергии (конкретный вид будет определен ниже), r — мощность источников энергии, $\boldsymbol{q}$ — плотность теплового потока, μ_α — обобщенный химический потенциал. Величины ε_{tot}, ε и r отнесены к единице массы. Слагаемые с $\boldsymbol{\xi}_\alpha$ и γ_α, в правой части (3.13) описывают скорость изменения энергии за счет работы микронапряжений и внешних микросил в единицу времени [14, 17].

Баланс импульса представлен уравнением (3.11). Подчеркнем, что импульс единицы объема $\rho\boldsymbol{u}$ отличается от плотности потока массы $\boldsymbol{j}_m := \rho\boldsymbol{u}_m$. Важно заметить, что при этом их равенство не исключается. Это предположение лежит в основе квазигидродинамической регуляризации [13]. Вектор, составляющий разницу, обозначим $\boldsymbol{w} := \boldsymbol{u}_m - \boldsymbol{u}$. Ниже для введеного вектора будет установлено определяющее соотношение. Предположение об отличии потока массы от объемного импульса также используется и в других работах [23, 24]. Заметим, что ввиду сделанного предположения величину $\boldsymbol{u}$ следовало бы назвать «импульсом единицы массы». Однако, придерживаясь устоявшейся терминологии, мы будем называть ее «скоростью», отличая от *массовой* скорости $\boldsymbol{u}_m$.

В (3.11) $\boldsymbol{\Pi}^*$ — тензор напряжений, $\boldsymbol{f}$ — плотность внешних массовых сил. Для случая неполярных сред тензор напряжений с учетом КГиД-регуляризации имеет вид:

$$\boldsymbol{\Pi}^* = \boldsymbol{\Pi} + \boldsymbol{\Pi}^w, \quad \boldsymbol{\Pi}^w := \rho\boldsymbol{u} \otimes \boldsymbol{w}, \tag{3.17}$$

где $\mathbf{\Pi}$ — некоторый *симметричный* тензор второго ранга.

Вид (3.17) можно обосновать следующим образом. Закон сохранения момента импульса материального объема относительно начала координат имеет вид

$$\frac{d}{dt}\int_V \boldsymbol{x}\times\rho\boldsymbol{u}\,dV = \int_{\partial V}\boldsymbol{x}\times(\boldsymbol{n}\cdot\mathbf{\Pi}^*)\,d\sigma + \int_V \boldsymbol{x}\times\rho\boldsymbol{f}\,dV. \tag{3.18}$$

С помощью теоремы Гаусса–Остроградского перепишем первое слагаемое в правой части (3.18) в виде

$$\int_{\partial V}\boldsymbol{x}\times(\boldsymbol{n}\cdot\mathbf{\Pi}^*)\,d\sigma = -\int_{\partial V}\boldsymbol{n}\cdot(\mathbf{\Pi}^*\times\boldsymbol{x})\,d\sigma = -\int_V \nabla\cdot(\mathbf{\Pi}^*\times\boldsymbol{x})\,d\sigma, \tag{3.19}$$

Представим подынтегральное выражение в (3.19) в виде

$$-\nabla\cdot(\mathbf{\Pi}^*\times\boldsymbol{x}) = -(\nabla\cdot\mathbf{\Pi}^*)\times\boldsymbol{x} - (\mathbf{\Pi}^{*\mathrm{T}}\cdot\nabla)\times\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}\times(\nabla\cdot\mathbf{\Pi}^*) + \epsilon:\mathbf{\Pi}^*, \tag{3.20}$$

где при переходе к последнему равенству учтено $\nabla\boldsymbol{x}\equiv\mathbf{I}$. Поскольку масса материального объема V сохраняется, то ввиду равенств (3.19), (3.20) выражение (3.18) можем записать в дифференциальном виде

$$\rho(\boldsymbol{x}\times\boldsymbol{u})^{\boldsymbol{\cdot}} = \boldsymbol{x}\times(\nabla\cdot\mathbf{\Pi}^*) + \epsilon:\mathbf{\Pi}^* + \boldsymbol{x}\times\rho\boldsymbol{f}. \tag{3.21}$$

Применяя правило дифференцирования векторного произведения, определение массовой скорости (3.4) и тождество $\boldsymbol{u}\times\boldsymbol{u}\equiv 0$, перепишем левую часть (3.21):

$$\rho(\boldsymbol{x}\times\boldsymbol{u})^{\boldsymbol{\cdot}} = \rho\boldsymbol{x}\times\dot{\boldsymbol{u}} - \rho\boldsymbol{w}\times\boldsymbol{u} = \boldsymbol{x}\times\left(\rho\dot{\boldsymbol{u}}\right) + \epsilon:(\rho\boldsymbol{u}\otimes\boldsymbol{w}), \tag{3.22}$$

где в последнем равенстве использовано свойство кососимметричности векторного произведения и тождество $\boldsymbol{u}\times\boldsymbol{w}\equiv\epsilon:(\boldsymbol{u}\otimes\boldsymbol{w})$. Подставим в последнее равенство в (3.22) выражение для $\rho\dot{\boldsymbol{u}}$ из уравнения баланса импульса (3.11) и воспользуемся получившимся результатом в (3.21). Таким образом, закон сохранения момента импульса сводится к уравнению

$$\epsilon:(\mathbf{\Pi}^* - \rho\boldsymbol{u}\otimes\boldsymbol{w}) = 0,$$

которое тождественно выполнено, если величина в скобках является некоторым *симметричным* тензором, который обозначим как $\mathbf{\Pi}$. Что и завершает обоснование представления (3.17).

3.5 Вид определяющих соотношений

Данный раздел посвящен выводу ограничений на вид определяющих соотношений, замыкающих модель (3.10) – (3.13). Для этого использована так называемая процедура Колмана–Нолла [21, 25, 26]. Она является конструктивной и широко используется [20, 22, 33]. Основная идея состоит в том, что определяющие соотношения должны иметь такой вид, чтобы любые процессы, допустимые исходной системой уравнений, удовлетворяли второму закону термодинамики в форме неравенства Клазиуса–Дюгема [35]:

$$\rho\dot{s} + \operatorname{div}\left(\frac{1}{\theta}(\boldsymbol{q} - \hat{\mu}_\alpha \boldsymbol{h}_\alpha)\right) - \frac{\rho r}{\theta} \geqslant 0. \tag{3.23}$$

В (3.23) s — массовая плотность энтропии.

Получим уравнение баланса кинетической энергии. Используя формулу (2.1), вид (3.17) и симметричность $\mathbf{\Pi}$, получим

$$\boldsymbol{u} \cdot \operatorname{div} \mathbf{\Pi}^* = \operatorname{div}(\mathbf{\Pi}^* \cdot \boldsymbol{u}) - \mathbf{\Pi} : \mathbf{D} - \mathbf{\Pi} : \mathbf{D}^w - \mathbf{\Pi}^w : (\nabla \otimes \boldsymbol{u}), \tag{3.24}$$

где

$$\mathbf{D} := \operatorname{sym}(\nabla \otimes \boldsymbol{u}_m) \equiv \operatorname{sym} \mathbf{L} \tag{3.25}$$

— тензор скоростей деформаций, $\mathbf{D}^w := \operatorname{sym}(\nabla \otimes \boldsymbol{w})$. Подчеркнем, что тензор $\mathbf{D}$ определяется с помощью *массовой* скорости $\boldsymbol{u}_m$, а не $\boldsymbol{u}$.

Подстановка (3.9) в (3.25) и применение правила Лейбница дают

$$\mathbf{D} = \tfrac{1}{2}\mathbf{F}^{-1\mathrm{T}} \cdot \dot{\mathbf{C}} \cdot \mathbf{F}^{-1}, \tag{3.26}$$

где $\mathbf{C} := \mathbf{F}^{\mathrm{T}} \cdot \mathbf{F}$ — правый тензор деформации Коши–Грина,

Умножим уравнение баланса импульса (3.11) на $\boldsymbol{u}$ и воспользуемся (3.24) и (3.26):

$$\begin{aligned} \tfrac{1}{2}\rho(|\boldsymbol{u}|^2)^{\bullet} = \operatorname{div}(\mathbf{\Pi}^* \cdot \boldsymbol{u}) - \tfrac{1}{2}(\mathbf{F}^{-1} \cdot \mathbf{\Pi} \cdot \mathbf{F}^{-1\mathrm{T}}) : \dot{\mathbf{C}} \\ - \mathbf{\Pi} : \mathbf{D}^w - \mathbf{\Pi}^w : (\nabla \otimes \boldsymbol{u}) + \rho \boldsymbol{f} \cdot \boldsymbol{u}. \end{aligned} \tag{3.27}$$

Теперь получим уравнение баланса внутренней энергии. Для любой скалярной величины β справедливо тождество [21, раздел 9.4] (см. также [31])

$$\nabla\dot{\beta} = (\nabla\beta)^{\bullet} + \mathbf{L}^{\mathrm{T}} \cdot \nabla\beta. \tag{3.28}$$

Обозначая

$$\mathbf{Q} := \nabla\rho_\alpha \otimes \boldsymbol{\xi}_\alpha, \tag{3.29}$$

с учетом (3.28) и тождества $\boldsymbol{\xi}_\kappa \cdot \mathbf{L}^{\mathrm{T}} \cdot \nabla\rho_\kappa \equiv \mathbf{L} : (\nabla\rho_\kappa \otimes \boldsymbol{\xi}_\kappa)$, получаем

$$\boldsymbol{\xi}_\alpha \cdot \nabla\dot{\rho}_\alpha = \boldsymbol{\xi}_\alpha \cdot (\nabla\rho_\alpha)^{\bullet} + \mathbf{L} : \mathbf{Q}. \tag{3.30}$$

Умножим уравнение (3.12) на $\dot{\rho}_\alpha$, просуммируем по α, применим правило Лейбница и учтем равенство (3.30):

$$\operatorname{div}\left(\boldsymbol{\xi}_\alpha\dot{\rho}_\alpha\right)+\gamma_\alpha\dot{\rho}_\alpha=-\pi_\alpha\dot{\rho}_\alpha+\boldsymbol{\xi}_\alpha\cdot(\nabla\rho_\alpha)^{\boldsymbol{\cdot}}+\mathbf{L}:\mathbf{Q}. \tag{3.31}$$

Далее уравнение (3.10) умножим на $\hat{\mu}_\alpha$ и снова применим правило Лейбница:

$$\hat{\mu}_\alpha\dot{\rho}_\alpha+\hat{\mu}_\alpha\rho_\alpha\operatorname{div}\boldsymbol{u}_m-\boldsymbol{h}_\alpha\cdot\nabla\hat{\mu}_\alpha=-\operatorname{div}(\hat{\mu}_\alpha\boldsymbol{h}_\alpha)+m_\alpha\hat{\mu}_\alpha. \tag{3.32}$$

Теперь, вычитая (3.27) из баланса полной энергии (3.13), подставляя (3.31) и (3.32) в результат, получаем уравнение для внутренней энергии

$$\begin{aligned}\rho\dot{\varepsilon}+\operatorname{div}\boldsymbol{q}-\rho r= \quad & \operatorname{div}(\boldsymbol{a}-\boldsymbol{\Pi}^*\cdot\boldsymbol{u})+\hat{\mu}_\alpha\dot{\rho}_\alpha+\hat{\mu}_\alpha\rho_\alpha\operatorname{div}\boldsymbol{u}_m-\boldsymbol{h}_\alpha\cdot\nabla\hat{\mu}_\alpha\\ & -\pi_\alpha\dot{\rho}_\alpha+\boldsymbol{\xi}_\alpha\cdot(\nabla\rho_\alpha)^{\boldsymbol{\cdot}}+\mathbf{L}:\mathbf{Q}+\tfrac{1}{2}(\mathbf{F}^{-1}\cdot\boldsymbol{\Pi}\cdot\mathbf{F}^{-1\mathrm{T}}):\dot{\mathbf{C}}\\ & +\boldsymbol{\Pi}:\mathbf{D}^w+\boldsymbol{\Pi}^w:(\nabla\otimes\boldsymbol{u})-\rho\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{f}.\end{aligned} \tag{3.33}$$

Перейдем к выводу диссипативного неравенства для массовой плотности свободной энергии Гельмгольца $\psi:=\varepsilon-\theta s$. Выразим $\dot{s}$ из выражения $\dot{\psi}=\dot{\varepsilon}-\dot{\theta}s-\theta\dot{s}$ и подставим его в (3.23):

$$\rho\dot{\psi}\leqslant\rho\dot{\varepsilon}+\operatorname{div}\boldsymbol{q}-\rho r-\rho s\dot{\theta}-\theta^{-1}\boldsymbol{q}\cdot\nabla\theta+\theta^{-1}\hat{\mu}_\alpha\boldsymbol{h}_\alpha\cdot\nabla\theta-\operatorname{div}(\hat{\mu}_\alpha\boldsymbol{h}_\alpha). \tag{3.34}$$

Справедливы равенства

$$\mathbf{L}:\mathbf{Q}=\mathbf{D}:\mathbf{Q}^s+\mathbf{W}:\mathbf{Q}^k=\tfrac{1}{2}(\mathbf{F}^{-1}\cdot\mathbf{Q}^s\cdot\mathbf{F}^{-1\mathrm{T}}):\dot{\mathbf{C}}+\mathbf{W}:\mathbf{Q}^k, \tag{3.35}$$

$$\boldsymbol{\Pi}:\mathbf{D}^w=\boldsymbol{\Pi}:(\nabla\otimes\boldsymbol{w})=\operatorname{div}(\boldsymbol{\Pi}\cdot\boldsymbol{w})-\boldsymbol{w}\cdot\operatorname{div}\boldsymbol{\Pi}, \tag{3.36}$$

где $\mathbf{Q}^s:=\operatorname{sym}\mathbf{Q}$, $\mathbf{Q}^k:=\operatorname{skw}\mathbf{Q}$, $\mathbf{W}:=\operatorname{skw}\mathbf{L}$. В (3.35) использовано равенство (3.26), в (3.36) учтены симметричность $\boldsymbol{\Pi}$ и формула (2.1).

Подстановка (3.33) в (3.34) с учетом тождества $\boldsymbol{\Pi}^w:(\nabla\otimes\boldsymbol{u})\equiv\rho\boldsymbol{w}\cdot\{(\boldsymbol{u}\cdot\nabla)\boldsymbol{u}\}$ и равенств (3.35), (3.36) приводит к диссипативному неравенству для свободной энергии Гельмгольца:

$$\begin{aligned}\rho\dot{\psi}\leqslant\quad & (\hat{\mu}_\alpha-\pi_\alpha)\dot{\rho}_\alpha+\boldsymbol{\xi}_\alpha\cdot(\nabla\rho_\alpha)^{\boldsymbol{\cdot}}-\rho s\dot{\theta}+\hat{\mu}_\alpha\rho_\alpha\operatorname{div}\boldsymbol{u}_m\\ & +\tfrac{1}{2}(\mathbf{F}^{-1}\cdot(\boldsymbol{\Pi}+\mathbf{Q}^s)\cdot\mathbf{F}^{-1\mathrm{T}}):\dot{\mathbf{C}}+\boldsymbol{w}\cdot\{-\rho\boldsymbol{f}-\operatorname{div}\boldsymbol{\Pi}+\rho(\boldsymbol{u}\cdot\nabla)\boldsymbol{u}\}\\ & +\mathbf{Q}^k:\mathbf{W}-\theta^{-1}\boldsymbol{q}\cdot\nabla\theta-\boldsymbol{h}_\alpha\cdot\nabla\hat{\mu}_\alpha+\theta^{-1}\hat{\mu}_\alpha\boldsymbol{h}_\alpha\cdot\nabla\theta\\ & +\operatorname{div}(\boldsymbol{a}-\hat{\mu}_\alpha\boldsymbol{h}_\alpha-\boldsymbol{\Pi}^*\cdot\boldsymbol{u}+\boldsymbol{\Pi}\cdot\boldsymbol{w}).\end{aligned} \tag{3.37}$$

Перейдем к определению ограничений на вид определяющих соотношений с помощью процедуры Колмана–Нолла. Введем наборы переменных $\mathcal{R}(\boldsymbol{x},t)$ и $\Lambda(\boldsymbol{x},t)$:

$$\mathcal{R}:=\big\{\rho_\alpha,\nabla\rho_\alpha,\hat{\mu}_\alpha,\nabla\hat{\mu}_\alpha,\theta,\nabla\theta,\mathbf{C}\big\},\qquad\Lambda:=\big\{\psi,\boldsymbol{\Pi},\pi_\alpha,s,\boldsymbol{\xi}_\alpha,\boldsymbol{q},\boldsymbol{w},\boldsymbol{a},\boldsymbol{h}_\alpha\big\}.$$

Будем предполагать, что переменные Λ зависят как от переменных $\mathcal{R}$, так и от скоростей изменения ρ_α и $\mathbf{C}$. Соответствующий набор обозначим $\dot{\mathcal{R}}$. Таким образом,

$$\Lambda = \Lambda(\mathcal{R}, \dot{\mathcal{R}}), \qquad \dot{\mathcal{R}} := \{\dot{\rho}_\alpha, \dot{\mathbf{C}}\}.$$

Обратим внимание, что, следуя [17], в набор независимых переменных $\mathcal{R}$ также включены $\hat{\mu}_\alpha$ и $\nabla\hat{\mu}_\alpha$.

Подставим полную производную по времени от $\psi = \psi(\mathcal{R}, \dot{\mathcal{R}})$ в (3.37). Получим

$$\begin{aligned} 0 \leqslant \;& (\hat{\mu}_\alpha - \pi_\alpha - \rho\partial_{\rho_\alpha}\psi)\dot{\rho}_\alpha + \hat{\mu}_\alpha\rho_\alpha \operatorname{div}\boldsymbol{u}_m \\ & - (\rho s + \rho\partial_\theta\psi)\dot{\theta} + (\boldsymbol{\xi}_\alpha - \rho\partial_{\nabla\rho_\alpha}\psi)\cdot(\nabla\rho_\alpha)^{\bullet} - \rho\Xi \\ & - \theta^{-1}\boldsymbol{q}\cdot\nabla\theta - \boldsymbol{h}_\alpha\cdot\nabla\hat{\mu}_\alpha + \theta^{-1}\hat{\mu}_\alpha\boldsymbol{h}_\alpha\cdot\nabla\theta \\ & + \mathbf{Q}^k : \mathbf{W} + \left[\tfrac{1}{2}\mathbf{F}^{-1}\cdot(\mathbf{\Pi} + \mathbf{Q}^s)\cdot\mathbf{F}^{-1\mathrm{T}} - \rho\partial_{\mathbf{C}}\psi\right] : \dot{\mathbf{C}} \\ & + \boldsymbol{w}\cdot\{-\rho\boldsymbol{f} - \operatorname{div}\mathbf{\Pi} + \rho(\boldsymbol{u}\cdot\nabla)\boldsymbol{u}\} + \operatorname{div}(\boldsymbol{a} - \hat{\mu}_\alpha\boldsymbol{h}_\alpha - \mathbf{\Pi}^*\cdot\boldsymbol{u} + \mathbf{\Pi}\cdot\boldsymbol{w}), \end{aligned} \tag{3.38}$$

где для краткости введено обозначение

$$\Xi := (\partial_{\dot{\rho}_\alpha}\psi)\,\ddot{\rho}_\alpha + (\partial_{\dot{\mathbf{C}}}\psi) : \ddot{\mathbf{C}} + (\partial_{\hat{\mu}_\alpha}\psi)\dot{\hat{\mu}}_\alpha + (\partial_{\nabla\hat{\mu}_\alpha}\psi)\cdot(\nabla\hat{\mu}_\alpha)^{\bullet} + (\partial_{\nabla\theta}\psi)\cdot(\nabla\theta)^{\bullet}.$$

Преобразуем первую строку в (3.38). Для этого воспользуемся равенством

$$-\rho(\partial_{\rho_\alpha}\psi)\dot{\rho}_\alpha = -(\partial_{\rho_\alpha}\tilde{\psi})\dot{\rho}_\alpha - \tilde{\psi}\operatorname{div}\boldsymbol{u}_m, \tag{3.39}$$

верным в силу (3.15) и равенств

$$\rho\partial_{\rho_\alpha}\psi = \partial_{\rho_\alpha}(\rho\psi) - \psi\partial_{\rho_\alpha}\rho = \partial_{\rho_\alpha}\tilde{\psi} - \psi, \qquad \sum_\alpha(\psi\dot{\rho}_\alpha) \equiv \psi\dot{\rho}.$$

Здесь $\tilde{\psi} := \rho\psi$ — объемная плотность свободной энергии Гельмгольца.

С учетом (3.39) для первой строки в (3.38) имеем

$$\begin{aligned} &(\hat{\mu}_\alpha - \pi_\alpha - \rho\partial_{\rho_\alpha}\psi)\dot{\rho}_\alpha + \hat{\mu}_\alpha\rho_\alpha\operatorname{div}\boldsymbol{u}_m \\ &\qquad = \left\{\hat{\mu}_\alpha - \pi_\alpha - \partial_{\rho_\alpha}\tilde{\psi}\right\}\dot{\rho}_\alpha + \tfrac{1}{2}\left[\mathbf{F}^{-1}\cdot\Big((\hat{\mu}_\alpha\rho_\alpha - \tilde{\psi})\mathbf{I}\Big)\cdot\mathbf{F}^{-1\mathrm{T}}\right] : \dot{\mathbf{C}}, \end{aligned} \tag{3.40}$$

где мы также воспользовались тождествами $\operatorname{div}\boldsymbol{u}_m \equiv \mathbf{I} : \mathbf{D}$ и (3.26).

Существует такой допустимый термодинамический процесс, при котором $\dot{\rho}_\alpha$, $\ddot{\rho}_\alpha$, $(\nabla\rho_\alpha)^{\bullet}$ являются независимыми (рассуждения аналогичны [21, p. 233] и [30, p. 55], см. также [17]), а другие слагаемые равны нулю (равенство нулю слагаемого с дивергенцией будет обеспечено выбором $\boldsymbol{a}$, который приведен ниже). Поэтому может случиться так, что $\ddot{\rho}_\alpha$, $(\nabla\rho_\alpha)^{\bullet}$ также равны нулю. Отсюда следует, что для выполнения (3.38) необходимо обеспечить положительность первого слагаемого в первой строке (3.38). Поскольку коэффициент при $\dot{\rho}_\alpha$ зависит от $\dot{\rho}_\alpha$, то необходимо

$$\hat{\mu}_\kappa = \pi_\kappa + \partial_{\rho_\kappa}\tilde{\psi} + b_\kappa \dot{\rho}_\kappa, \tag{3.41}$$

где $b_\kappa \geqslant 0$. Далее будем считать, что $b_\kappa = b_\kappa(\mathcal{R})$. Суммирования по κ нет.

Рассмотрим вторую строку в (3.38). Аналогичные рассуждения приводят к

$$\begin{gathered} \boldsymbol{\xi}_\alpha = \rho\partial_{\nabla\rho_\alpha}\psi, \quad s = -\partial_\theta\psi, \\ \partial_{\dot{\rho}_\alpha}\psi = 0, \quad \partial_{\dot{\mathbf{C}}}\psi = \mathbf{0}, \quad \partial_{\hat{\mu}_\alpha}\psi = 0, \quad \partial_{\nabla\theta}\psi = \mathbf{0}, \quad \partial_{\nabla\hat{\mu}_\alpha}\psi = \mathbf{0}. \end{gathered} \tag{3.42}$$

В частности, отсюда следует ограничение на вид функциональной зависимости для свободной энергии:

$$\psi = \psi(\mathcal{R}^*), \quad \mathcal{R}^* := \big\{\rho_\alpha, \nabla\rho_\alpha, \mathbf{C}, \theta\big\}. \tag{3.43}$$

Таким образом, все слагаемые во второй строке в (3.38) равны нулю.

Рассмотрим третью строку в (3.38). Сумму второго и третьего слагаемых преобразуем следующим образом:

$$-\boldsymbol{h}_\alpha \cdot \nabla\hat{\mu}_\alpha + \theta^{-1}\hat{\mu}_\alpha \boldsymbol{h}_\alpha \cdot \nabla\theta = \theta\sum_{\alpha=2}^{N} \boldsymbol{h}_\alpha \cdot \nabla\left(\frac{1}{\theta}(\hat{\mu}_1 - \hat{\mu}_\alpha)\right), \tag{3.44}$$

где использованы равенство $-\boldsymbol{h}_1 = \sum_{\alpha=2}^{N}\boldsymbol{h}_\alpha$, верное в силу первого предположения в (3.14), и тождество

$$\nabla\hat{\mu}_\alpha \equiv \nabla\left(\theta\frac{\hat{\mu}_\alpha}{\theta}\right) = \theta\nabla\left(\frac{\hat{\mu}_\alpha}{\theta}\right) + \frac{\hat{\mu}_\alpha}{\theta}\nabla\theta.$$

С учетом (3.44) третью строку в (3.38) можно представить в виде

$$\begin{aligned} \Upsilon : &= -\theta^{-1}\boldsymbol{q}\cdot\nabla\theta - \boldsymbol{h}_\alpha\cdot\nabla\hat{\mu}_\alpha + \theta^{-1}\hat{\mu}_\alpha\boldsymbol{h}_\alpha\cdot\nabla\theta \\ &= \theta\boldsymbol{q}\cdot\nabla\left(\frac{1}{\theta}\right) + \theta\sum_{\alpha=2}^{N}\boldsymbol{h}_\alpha\cdot\nabla\left(\frac{1}{\theta}(\hat{\mu}_1 - \hat{\mu}_\alpha)\right). \end{aligned}$$

Положим

$$\boldsymbol{q} = l_{11}\nabla\left(\frac{1}{\theta}\right) + \sum_{\alpha=2}^{N} l_{1\alpha}\nabla\left(\frac{1}{\theta}(\hat{\mu}_1 - \hat{\mu}_\alpha)\right), \tag{3.45}$$

$$\boldsymbol{h}_\beta = l_{\beta 1}\nabla\left(\frac{1}{\theta}\right) + \sum_{\alpha=2}^{N} l_{\beta\alpha}\nabla\left(\frac{1}{\theta}(\hat{\mu}_1 - \hat{\mu}_\alpha)\right), \tag{3.46}$$

где $l_{\kappa\nu}(\mathcal{R})$ — феноменологические (кинетические) коэффициенты, являющиеся скалярными функциями, $\kappa, \nu = 1, \dots, N$. Если матрица коэффициентов $\{l_{\kappa\nu}\}$ является симметричной (условие взаимности Онзагера) и неотрицательно определенной, то $\Upsilon \geqslant 0$ [35].

Рассмотрим последнее слагаемое в третьей строке неравенства (3.38). Как следует из (3.29) и (3.42), для определения конкретного вида тензора капиллярных напряжений $\mathbf{Q}$ необходимо задать вид свободной энергии Гельмгольца. Следуя [29, 36], в настоящей работе для *объемной* плотности энергии Гельмгольца положим

$$\tilde{\psi}(\mathcal{R}^*) := \tilde{\psi}_0(\rho_1, \dots, \rho_N, \mathbf{C}, \theta) + \tfrac{1}{2}\lambda_{\alpha\beta}\nabla\rho_\alpha \cdot \nabla\rho_\beta, \tag{3.47}$$

где

$$\lambda_{\alpha\beta}(\rho_1, \dots \rho_N) > 0, \qquad \lambda_{\alpha\beta} = \lambda_{\beta\alpha}$$

— капиллярные коэффициенты, обладающие свойством симметрии по компонентам смеси. Поэтому из (3.42) и (3.29) получаем

$$\boldsymbol{\xi}_\alpha = \lambda_{\alpha\beta}\nabla\rho_\beta, \quad \mathbf{Q} = \lambda_{\alpha\beta}\nabla\rho_\alpha \otimes \nabla\rho_\beta. \tag{3.48}$$

Напомним, что по повторяющимся индексам α и β подразумевается суммирование от 1 до N (по числу компонентов смеси). Из (3.48) получаем $\mathbf{Q} = \mathbf{Q}^s$ и $\mathbf{Q}^k = \mathbf{0}$, а значит $\mathbf{W} : \mathbf{Q}^k = 0$. Выражение для вектора $\boldsymbol{w}$ будет получено ниже. При выводе первого равенства в (3.48) использовано тождество $\rho\partial_{\nabla\rho_\alpha}\psi \equiv \partial_{\nabla\rho_\alpha}\tilde{\psi}$.

С помощью выражения (3.48) получим конкретный вид для обобщенных химических потенциалов $\hat{\mu}_\alpha$. Для этого выразим π_κ из (3.12), подставим результат в (3.41) с учетом (3.47) и первого равенства в (3.48):

$$\hat{\mu}_\kappa = -\operatorname{div}(\lambda_{\kappa\beta}\nabla\rho_\beta) + \mu_\kappa + \tfrac{1}{2}(\partial_{\rho_\kappa}\lambda_{\alpha\beta})\nabla\rho_\alpha \cdot \nabla\rho_\beta - \gamma_\kappa + b_\kappa\dot{\rho}_\kappa, \tag{3.49}$$

где $\mu_\kappa(\mathcal{R}^*) := \partial_{\rho_\kappa}\tilde{\psi}_0$ — химический потенциал (классический).

Следуя [21, 26, 39], введем $\mathbf{\Pi}_e(\mathcal{R}) := \mathbf{\Pi}(\mathcal{R}, \dot{\mathcal{R}})\Big|_{\dot{\mathcal{R}}=0}$ — тензор равновесных напряжений, $\mathbf{\Pi}_v(\mathcal{R}, \dot{\mathcal{R}}) := \mathbf{\Pi}(\mathcal{R}, \dot{\mathcal{R}}) - \mathbf{\Pi}_e(\mathcal{R})$ — тензор диссипативных (вязких) напряжений. С учетом представления первой строки неравенства (3.38) в виде (3.40) и $\mathbf{Q} = \mathbf{Q}^s$ для слагаемых, пропорциональных $\dot{\mathbf{C}}$, имеем

$$\begin{aligned}\Big[\tfrac{1}{2}\mathbf{F}^{-1} \cdot (\mathbf{\Pi} + \mathbf{Q}) \cdot \mathbf{F}^{-1\mathrm{T}} - \rho\partial_{\mathbf{C}}\psi\Big] : \dot{\mathbf{C}} + \tfrac{1}{2}\Big[\mathbf{F}^{-1} \cdot \big((\hat{\mu}_\alpha\rho_\alpha - \tilde{\psi})\mathbf{I}\big) \cdot \mathbf{F}^{-1\mathrm{T}}\Big] : \dot{\mathbf{C}} \\ = \Big\{\tfrac{1}{2}\mathbf{F}^{-1} \cdot \big(\mathbf{\Pi}_e + \mathbf{Q} + (\hat{\mu}_\alpha\rho_\alpha - \tilde{\psi})\mathbf{I}\big) \cdot \mathbf{F}^{-1\mathrm{T}} - \rho\partial_{\mathbf{C}}\psi\Big\} : \dot{\mathbf{C}} + \mathbf{\Pi}_v : \mathbf{D},\end{aligned} \tag{3.50}$$

где мы также воспользовались равенством (3.26).

Сумма в фигурных скобках в правой части (3.50) не зависит от $\dot{\mathbf{C}}$. В результате

$$\mathbf{\Pi}_e = 2\rho\mathbf{F}\cdot\partial_{\mathbf{C}}\psi\cdot\mathbf{F}^{\mathrm{T}} - \mathbf{Q} - (\hat{\mu}_\alpha\rho_\alpha - \tilde{\psi})\mathbf{I} \tag{3.51}$$

$$= 2\rho\mathbf{F}\cdot\partial_{\mathbf{C}}\psi\cdot\mathbf{F}^{\mathrm{T}} + \mathbf{\Pi}_\lambda - p\mathbf{I} + (\gamma_\alpha\rho_\alpha - b_\alpha\dot{\rho}_\alpha\rho_\alpha)\mathbf{I}, \tag{3.52}$$

где $p(\rho_1,\ldots,\rho_N,\theta,\mathbf{C}) := \mu_\alpha\rho_\alpha - \tilde{\psi}_0$ — термодинамическое давление,

$$\mathbf{\Pi}_\lambda := \Big(\rho_\alpha\operatorname{div}(\lambda_{\alpha\beta}\nabla\rho_\beta) + \tfrac{1}{2}\left(\lambda_{\alpha\beta} - \rho_\nu\partial_{\rho_\nu}\lambda_{\alpha\beta}\right)\nabla\rho_\alpha\cdot\nabla\rho_\beta\Big)\mathbf{I} - \mathbf{Q} \tag{3.53}$$

— тензор капиллярных напряжений. Равенство (3.52) получено с учетом (3.47) и (3.49).

Перепишем (3.38) с учетом (3.42), (3.48), (3.51):

$$\begin{aligned}0 \leqslant\ & b_\alpha(\dot{\rho}_\alpha)^2 + \Upsilon + \boldsymbol{w}\cdot\{-\rho\boldsymbol{f} + \rho(\boldsymbol{u}\cdot\nabla)\boldsymbol{u}\}\\ & + \operatorname{div}(\boldsymbol{a} - \hat{\mu}_\alpha\boldsymbol{h}_\alpha - \mathbf{\Pi}^*\cdot\boldsymbol{u} + \mathbf{\Pi}\cdot\boldsymbol{w}) - \boldsymbol{w}\cdot\operatorname{div}\mathbf{\Pi} + \mathbf{\Pi}_v : \mathbf{D}.\end{aligned} \tag{3.54}$$

Рассмотрим последнее слагаемое в правой части (3.54). Величина $\mathbf{\Pi}_v$ зависит от $\dot{\mathbf{C}}$, а значит и от $\mathbf{D}$. Поэтому если $\mathbf{\Pi}_v = {}^4\mathbf{L}_v : \mathbf{D}$, где ${}^4\mathbf{L}_v$ — тензор вязкости, являющийся неотрицательно определенным симметричным тензором четвертого ранга, то при остальных нулевых слагаемых неравенство (3.38) будет выполнено. Далее будем рассматривать изотропную среду. Тогда $\mathbf{\Pi}_v$ принимает вид

$$\mathbf{\Pi}_v = \zeta^*\mathrm{I}_1(\mathbf{D})\mathbf{I} + 2\eta\mathbf{D}, \tag{3.55}$$

где η — коэффициент сдвиговой (динамической) вязкости. Будем считать, что

$$\begin{aligned}\eta &= \eta\big(\mathrm{I}_1(\mathbf{D}), \mathrm{I}_2(\mathbf{D}), \mathrm{I}_3(\mathbf{D}), \theta, \rho_1, \ldots, \rho_N\big),\\ \zeta^* &= \zeta^*\big(\mathrm{I}_1(\mathbf{D}), \mathrm{I}_2(\mathbf{D}), \mathrm{I}_3(\mathbf{D}), \theta, \rho_1, \ldots, \rho_N\big).\end{aligned}$$

Введем обозначения

$$\mathbf{\Pi}_v^{\mathrm{NS}} := \zeta^*\mathrm{I}_1(\mathbf{D}^u)\mathbf{I} + 2\eta\mathbf{D}^u, \qquad \mathbf{\Pi}_v^{\mathrm{QH}} := \zeta^*\mathrm{I}_1(\mathbf{D}^w)\mathbf{I} + 2\eta\mathbf{D}^w.$$

Поскольку $\mathbf{D} \equiv \mathbf{D}^u - \mathbf{D}^w$, выражение (3.55) примет вид

$$\mathbf{\Pi}_v = \mathbf{\Pi}_v^{\mathrm{NS}} - \mathbf{\Pi}_v^{\mathrm{QH}}. \tag{3.56}$$

Как уже было отмечено, выражение (3.55), а значит и (3.56), удовлетворяет неравенству диссипации (3.38) в случае такого процесса, при котором все остальные слагаемые равны нулю. Тем не менее, можно подобрать определяющее соотношение, отличное от (3.56). Рассмотрим семейство замыканий для $\mathbf{\Pi}_v$, введя линейную параметризацию в (3.56):

$$\mathbf{\Pi}_v = \mathbf{\Pi}_v^{\mathrm{NS}} - \omega \mathbf{\Pi}_v^{\mathrm{QH}}, \tag{3.57}$$

где $\omega \in \mathbb{R}$ — некоторый постоянный параметр. Выражение (3.57) обобщает (3.56) и представляет собой подходящее определяющее соотношение при всех $\omega \in \mathbb{R}$.

Преобразуем сумму последних двух слагаемых в (3.54):

$$-\boldsymbol{w} \cdot \operatorname{div} \mathbf{\Pi} + \mathbf{\Pi}_v : \mathbf{D} = -\boldsymbol{w} \cdot \operatorname{div} \mathbf{\Pi}_e - \operatorname{div}(\mathbf{\Pi}_v \cdot \boldsymbol{w}) + \mathbf{\Pi}_v : \mathbf{D}^u, \tag{3.58}$$

где использованы равенства $\mathbf{D} = \mathbf{D}^u - \mathbf{D}^w$, $\mathbf{\Pi} = \mathbf{\Pi}_v + \mathbf{\Pi}_e$ и

$$-\boldsymbol{w} \cdot \operatorname{div} \mathbf{\Pi}_v = -\operatorname{div}(\mathbf{\Pi}_v \cdot \boldsymbol{w}) + \mathbf{\Pi}_v : (\nabla \otimes \boldsymbol{w}), \quad \mathbf{\Pi}_v : (\nabla \otimes \boldsymbol{w}) = \mathbf{\Pi}_v : \mathbf{D}^w,$$

последние два из которых верны в силу (2.1) и симметричности $\mathbf{\Pi}_v$ соответственно.

Ввиду тождеств $\mathbf{I} : \mathbf{D}^u \equiv \operatorname{tr} \mathbf{D}^u$ и $\mathbf{I} : \mathbf{D}^w \equiv \operatorname{tr} \mathbf{D}^w$ справедливо

$$\mathbf{\Pi}_v^{\mathrm{QH}} : \mathbf{D}^u = \zeta^* \operatorname{tr} \mathbf{D}^w \operatorname{tr} \mathbf{D}^u + 2\eta \mathbf{D}^w : \mathbf{D}^u = \mathbf{\Pi}_v^{\mathrm{NS}} : \mathbf{D}^w. \tag{3.59}$$

Используя (3.59), симметричность $\mathbf{\Pi}_v^{\mathrm{NS}}$ и формулу (2.1), получим

$$\begin{aligned} -\omega \mathbf{\Pi}_v^{\mathrm{QH}} : \mathbf{D}^u &= -\omega \mathbf{\Pi}_v^{\mathrm{NS}} : \mathbf{D}^w \\ &= -\omega \mathbf{\Pi}_v^{\mathrm{NS}} : (\nabla \otimes \boldsymbol{w}) = -\operatorname{div}(\omega \mathbf{\Pi}_v^{\mathrm{NS}} \cdot \boldsymbol{w}) + \boldsymbol{w} \cdot \operatorname{div}(\omega \mathbf{\Pi}_v^{\mathrm{NS}}). \end{aligned} \tag{3.60}$$

Теперь подставим (3.57) в правую часть (3.58) и воспользуемся (3.60). Равенство (3.58) примет вид

$$\begin{aligned} -\boldsymbol{w} \cdot \operatorname{div} \mathbf{\Pi} + \mathbf{\Pi}_v : \mathbf{D} = &- \boldsymbol{w} \cdot \operatorname{div}(\mathbf{\Pi}_e - \omega \mathbf{\Pi}_v^{\mathrm{NS}}) \\ &- \operatorname{div}\big(\big[(1+\omega)\mathbf{\Pi}_v^{\mathrm{NS}} - \omega \mathbf{\Pi}_v^{\mathrm{QH}}\big] \cdot \boldsymbol{w}\big) + \mathbf{\Pi}_v^{\mathrm{NS}} : \mathbf{D}^u. \end{aligned} \tag{3.61}$$

Равенство (3.61) подставим в правую часть (3.54) с учетом $\mathbf{\Pi} := \mathbf{\Pi}_e + \mathbf{\Pi}_v$ и (3.57):

$$\begin{aligned} 0 \leqslant\ & b_\alpha(\dot{\rho}_\alpha)^2 + \Upsilon + \boldsymbol{w} \cdot \big\{ -\rho \boldsymbol{f} + \rho(\boldsymbol{u} \cdot \nabla)\boldsymbol{u} - \operatorname{div} \mathbf{A}_\omega \big\} \\ &+ \operatorname{div}(\boldsymbol{a} - \hat{\mu}_\alpha \boldsymbol{h}_\alpha - \mathbf{\Pi}^* \cdot \boldsymbol{u} + \mathbf{A}_\omega \cdot \boldsymbol{w}) + \mathbf{\Pi}_v^{\mathrm{NS}} : \mathbf{D}^u, \end{aligned} \tag{3.62}$$

где введено обозначение $\mathbf{A}_\omega := \mathbf{\Pi}_e - \omega \mathbf{\Pi}_v^{\mathrm{NS}}$. Таким образом, если положить

$$\boldsymbol{a} = \hat{\mu}_\alpha \boldsymbol{h}_\alpha + \mathbf{\Pi}^* \cdot \boldsymbol{u} - \mathbf{A}_\omega \cdot \boldsymbol{w}, \tag{3.63}$$

$$\boldsymbol{w} = \tau \big\{ (\boldsymbol{u} \cdot \nabla)\boldsymbol{u} - \rho^{-1} \operatorname{div} \mathbf{A}_\omega - \boldsymbol{f} \big\}, \tag{3.64}$$

где $\tau = \tau(\mathcal{R}^*) \geqslant 0$ — некоторый параметр, имеющий размерность времени, то неравенство (3.62) приобретает вид

$$0 \leqslant b_\alpha(\dot{\rho}_\alpha)^2 + \Upsilon + |\boldsymbol{w}|^2 \tau^{-1}\rho + \mathbf{\Pi}_v^{\mathrm{NS}} : \mathbf{D}^u. \tag{3.65}$$

Оценим последнеее слагаемое в (3.65):

$$\begin{aligned} \mathbf{\Pi}_v^{\mathrm{NS}} : \mathbf{D}^u &= \left\{(\zeta^* \operatorname{tr}\mathbf{D}^u)\mathbf{I} + 2\eta\mathbf{D}^u\right\} : \left\{\mathbf{D}_0^u + \tfrac{1}{3}(\operatorname{tr}\mathbf{D}^u)\mathbf{I}\right\} \\ &= 2\eta|\mathbf{D}_0^u|^2 + \zeta(\operatorname{tr}\mathbf{D}^u)^2 \geqslant 0. \end{aligned} \tag{3.66}$$

Здесь $\zeta := \zeta^* + \frac{2}{3}\eta$ — объемная вязкость. Поскольку неравенство (3.66) должно выполняться для любых процессов, то необходимо $\eta \geqslant 0$ и $\zeta \geqslant 0$ (подробнее см., например, [21, с. 255]).

Таким образом, определяющие соотношения (3.42), (3.45), (3.46), (3.49) (3.48), (3.51), (3.63), (3.64), (3.57), а также вид (3.43), (3.47) обеспечивают выполнение второго закона термодинамики для любого решения системы уравнений (3.9) – (3.13).

При выводе определяющих соотношений для векторов $\boldsymbol{w}$ и $\boldsymbol{a}$ пришлось отойти от принципа равноприсутствия и расширить множество переменных, от которых указанные векторы могут зависеть. В противном случае эта зависимость оказалась бы тривиальной и они были бы равны нулю.

4 Уравнения модели в эйлеровых координатах

В настоящем разделе запишем уравнения выведенной модели в эйлеровом представлении. Начнем с уравнения баланса полной массы:

$$\partial_t\rho + \operatorname{div}(\rho\boldsymbol{u}_m) = 0, \tag{4.67}$$

которое получается из (3.15) непосредственным применением правила лейбница, и формулы для полной (материальной) производной (3.4).

Используя (4.67), аналогично записываем уравнения (3.10), (3.11) и (3.13) в эйлеровой постановке:

$$\partial_t\rho_\alpha + \operatorname{div}(\rho_\alpha\boldsymbol{u}_m) = -\operatorname{div}\boldsymbol{h}_\alpha + m_\alpha, \tag{4.68}$$

$$\partial_t(\rho\boldsymbol{u}) + \operatorname{div}(\rho\boldsymbol{u}_m \otimes \boldsymbol{u}) = \operatorname{div}\mathbf{\Pi}^* + \rho\boldsymbol{f}, \tag{4.69}$$

$$\begin{aligned} \partial_t(\rho\varepsilon_{\mathrm{tot}}) + \operatorname{div}(\rho\boldsymbol{u}_m\varepsilon_{\mathrm{tot}}) = \ & \rho\boldsymbol{u}_m \cdot \boldsymbol{f} + \operatorname{div}(\boldsymbol{a} - \boldsymbol{q} - \hat{\mu}_\alpha\boldsymbol{h}_\alpha) \\ & + \rho r + \operatorname{div}\left(\dot{\rho}_\alpha\boldsymbol{\xi}_\alpha\right) + \dot{\rho}_\alpha\gamma_\alpha + \hat{\mu}_\alpha m_\alpha. \end{aligned} \tag{4.70}$$

При этом в правой части уравнения (4.70) переменная $\dot{\rho}_\alpha$ непосредственно выражается из (3.10). Также заметим, что здесь нет необходимости выписывать уравнение баланса микросил (3.12), поскольку оно было учтено при выводе определяющих соотношений.

Непосредственное применение формулы для полной производной (3.4) к уравнению (3.7) дает уравнение для дисторсии в эйлеровой остановке

$$\partial_t \mathbf{F} + \boldsymbol{u}_m \cdot (\nabla \otimes \mathbf{F}) = (\nabla \otimes \boldsymbol{u}_m)^{\mathrm{T}} \cdot \mathbf{F}. \tag{4.71}$$

Отметим, что уравнение (4.71) не является консервативным. В некоторых задачах (например, в которых присутствуют ударные волны или другие сильные разрывы) консервативная форма предпочтительнее. Поэтому перепишем (4.71) в такой форме.

$$\partial_t (J^{-1}\mathbf{F}^{\mathrm{T}}) + \operatorname{div}(J^{-1}\{\boldsymbol{u}_m \otimes \mathbf{F}^{\mathrm{T}} - \mathbf{F} \otimes \boldsymbol{u}_m\}) = \mathbf{0}. \tag{4.72}$$

При этом вывод данного уравнения из (3.9) полностью аналогичен представленному в [33] (см. также [39]). Небольшое отличие заключается в том, что в настоящей работе массовой скоростью является вектор $\boldsymbol{u}_m$, а не $\boldsymbol{u}$.

Замечание 3. *Отметим, что в ряде задач для определения напряженно-деформированного состояния твердой фазы оказывается более удобным использование левого тензора деформации Коши–Грина* $\mathbf{B} = \mathbf{F} \cdot \mathbf{F}^{\mathrm{T}}$, *который также называют иногда тензором Фингера. Эволюционное уравнение для определения* $\mathbf{B}$ *легко получить из* (3.7) *умножением справа на* $\mathbf{F}^{\mathrm{T}}$, *умножением транспонированного уравнения* (3.7) *слева на* $\mathbf{F}$ *и сложением полученных результатов:*

$$\dot{\mathbf{B}} = \mathbf{L} \cdot \mathbf{B} + \mathbf{B} \cdot \mathbf{L}^{\mathrm{T}},$$

эйлерово представление которого получается непосредственным применением формулы (3.5)*. При этом предполагают, что свободная энергия зависит не от* $\mathbf{C}$*, а от* $\mathbf{B}$*. Если определяющее соотношение для тензора упругих напряжений содержит только* $\mathbf{B}$ *(как, например, для модели Сен-Венана–Кирхгофа), то дисторсию можно вовсе не использовать и считать* $\mathbf{B}$ *одной из первичных переменных.*

5 Некоторые частные случаи

В данном разделе приведены некоторые частные случаи модели (4.67)–(4.70), (4.72). Далее везде будем предполагать $\gamma_\alpha = 0$, $m_\alpha = 0$, $r = 0$, $b_\alpha = 0$.

5.1 Однофазная однокомпонентная модель движения жидкости

Рассмотрим однокомпонентную однофазную жидкость без нелокальных эффектов: $N = 1$, $\partial_{\dot{\mathbf{C}}}\psi = \mathbf{0}$, $\lambda_{11} = 0$. Из однокомпонентности следует $\boldsymbol{h}_1 = \mathbf{0}$.

При указанных ограничениях уравнения баланса полной массы (4.67) остается прежним, а уравнения балансов импульса (4.69) и энергии (4.70) примут следующий вид:

$$\partial_t(\rho\boldsymbol{u}) + \operatorname{div}(\rho\boldsymbol{u}_m \otimes \boldsymbol{u}) + \nabla p = \operatorname{div}\boldsymbol{\Pi}_v^{\mathrm{NS}} - \omega\operatorname{div}\boldsymbol{\Pi}_v^{\mathrm{QH}} + \operatorname{div}(\rho\boldsymbol{u}\otimes\boldsymbol{w}) + \rho\boldsymbol{f}, \tag{5.73}$$

$$\partial_t(\rho\varepsilon_{\mathrm{tot}}) + \operatorname{div}(\rho\boldsymbol{u}_m\varepsilon_{\mathrm{tot}}) = \rho\boldsymbol{u}_m\cdot\boldsymbol{f} + \operatorname{div}(\boldsymbol{a}-\boldsymbol{q}), \tag{5.74}$$

где учтено, что в рассматриваемом случае $\boldsymbol{\Pi}_e = -p\mathbf{I}$, и

$$\boldsymbol{w} = \rho^{-1}\tau\big\{(\rho\boldsymbol{u}\cdot\nabla)\boldsymbol{u} + \nabla p + \omega\operatorname{div}\boldsymbol{\Pi}_v^{\mathrm{NS}} - \rho\boldsymbol{f}\big\}, \tag{5.75}$$

$$\boldsymbol{a} = -\boldsymbol{u}_m p + \boldsymbol{\Pi}_v^{\mathrm{NS}}\cdot\boldsymbol{u} + \rho\boldsymbol{u}(\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{u}) + \omega\big(\boldsymbol{\Pi}_v^{\mathrm{NS}}\cdot\boldsymbol{w} - \boldsymbol{\Pi}_v^{\mathrm{QH}}\cdot\boldsymbol{u}\big). \tag{5.76}$$

Видно, что при $\omega = 0$ и $\tau > 0$ система (4.67), (5.73)–(5.76) сводится к стандартной регуляризованной системе уравнений из [34]; при $\tau = 0$ и $\omega \neq 0$ указанная система сводится к классическим уравненям Навье–Стокса вязкой сжимаемой жидкости. Таким образом, еще раз подчеркнем, что параметр ω характеризует только дополнительные регуляризующие добавки. Конкретный выбор значения параметра ω в настоящей работе не обсуждается. Ниже для простоты мы везде положим $\omega = 0$.

5.2 Двухфазная двухкомпонентная модель «жидкость–жидкость»

Рассмотрим модель для описания двухфазной двухкомпонентной ($N = 2$) смеси типа «жидкость–жидкость». Так же как и в разделе 5.1, поскольку обе фазы жидкие, имеем $\partial_{\mathbf{C}}\psi = \mathbf{0}$. На этот раз $\lambda_{\alpha\beta} > 0$. Феноменологические коэффициенты в (3.45) и (3.46) $l_{00} = \theta^2\varkappa$, $l_{11} = M(\rho_1,\rho_2) = M_0\rho_1\rho_2/\rho^2$, $l_{10} = l_{01} = 0$. Уравнения баланса массы компонентов, импульса и энергии примут следующий вид:

$$\partial_t\rho_1 + \operatorname{div}(\rho_1\boldsymbol{u}_m) = \operatorname{div}\big(M\nabla\big[\theta^{-1}(\hat\mu_1 - \hat\mu_2)\big]\big), \tag{5.77}$$

$$\partial_t\rho_2 + \operatorname{div}(\rho_2\boldsymbol{u}_m) = -\operatorname{div}\big(M\nabla\big[\theta^{-1}(\hat\mu_1 - \hat\mu_2)\big]\big), \tag{5.78}$$

$$\partial_t(\rho\boldsymbol{u}) + \operatorname{div}(\rho\boldsymbol{u}_m\otimes\boldsymbol{u}) + \nabla p = \operatorname{div}\boldsymbol{\Pi}_v^{\mathrm{NS}} + \operatorname{div}\boldsymbol{\Pi}^{\lambda} + \operatorname{div}(\rho\boldsymbol{u}\otimes\boldsymbol{w}) + \rho\boldsymbol{f}, \tag{5.79}$$

$$\begin{aligned}\partial_t(\rho\varepsilon_{\mathrm{tot}}) + \operatorname{div}(\rho\boldsymbol{u}_m\varepsilon_{\mathrm{tot}}) = {} & \operatorname{div}\big((\boldsymbol{\Pi}_v^{\mathrm{NS}} - \boldsymbol{\Pi}^{\lambda} - p\mathbf{I})\cdot\boldsymbol{u}\big) \\ & + \operatorname{div}\big(\dot\rho_\alpha\lambda_{\alpha\beta}\nabla\rho_\beta\big) + \operatorname{div}(\varkappa\nabla\theta) + \rho\boldsymbol{u}_m\cdot\boldsymbol{f} \\ & + \operatorname{div}\big((\boldsymbol{\Pi}^{\lambda} + p\mathbf{I})\cdot\boldsymbol{w} + \boldsymbol{u}(\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{w})\big).\end{aligned} \tag{5.80}$$

Выражение для тензора капилярных напряжений (3.53), обобщенных химических потенциалов (3.49) примут вид

$$\mathbf{\Pi}^* = \mathbf{\Pi}^\lambda - p\mathbf{I} + \mathbf{\Pi}_v^{\mathrm{NS}} + \rho(\boldsymbol{u}\otimes\boldsymbol{w}) \quad \hat{\mu}_\alpha = \mu_\alpha - \lambda_{\alpha\beta}\Delta\rho_\beta, \quad \mu_\alpha = \partial_{\rho_\alpha}\tilde{\psi}_0, \tag{5.81}$$

$$\mathbf{\Pi}^\lambda = \big(\rho_\alpha\lambda_{\alpha\beta}\Delta\rho_\beta + \tfrac{1}{2}\lambda_{\alpha\beta}\nabla\rho_\alpha\cdot\nabla\rho_\beta\big)\mathbf{I} - \lambda_{\alpha\beta}\nabla\rho_\alpha\otimes\nabla\rho_\beta, \tag{5.82}$$

где напомним, что по индексам α и β производится суммирование от 1 до $N = 2$.

Система (5.77), (5.78), (5.80) при $\tau = 0$ (а значит при $\boldsymbol{w} = \mathbf{0}$) переходит в систему, рассмотренную в [36]. При $\tau > 0$ и в изотермическом приближении (то есть без уравнения полной энергии (5.80)) регуляризованный вариант был рассмотрен в [37].

5.3 Двухфазная двухкомпонентная модель «жидкость–твердое тело»

Теперь рассмотрим случай двухфазной двухкомпонентной ($N = 2$) системы, в которой компонента $\alpha = 1$ представляет собой жидкость, а компонента $\alpha = 2$ — твердое упругое тело. Для простоты рассмотрим изотермический случай.

Уравнения баланса массы компонентов и баланса импульса будут иметь вид (5.77), (5.78) и (5.73) соответственно.

Свободную энергию представим в виде

$$\psi(\rho_1,\rho_2,\nabla\rho_1,\nabla\rho_2,\mathbf{C}) = \psi_{\mathrm{S}}(\mathbf{C},\rho_1,\rho_2) + \psi_{\mathrm{L}}(\rho_1,\rho_2) + \lambda_{\alpha\beta}\nabla\rho_\alpha\cdot\nabla\rho_\beta,$$

где ψ_{L} и ψ_{L} — свободная энергия жидкой и твердой компоненты соответственно (см. ниже). Одной из самых простых моделей геометрически нелинейного упругого материала является модель Сен-Венана–Кирхгофа [38, с. 455]

$$\psi_{\mathrm{el}}(\mathbf{E},\rho_1,\rho_2) = \mu_{\mathrm{el}}\mathbf{E}:\mathbf{E} + \tfrac{1}{2}\lambda_{\mathrm{el}}(\operatorname{tr}\mathbf{E})^2, \tag{5.83}$$

где $\mathbf{E} = (\mathbf{C}-\mathbf{I})/2$ — тензор деформации Грина–Лагранжа, $\lambda_{\mathrm{el}}(\rho_1,\rho_2) > 0$ — первый коэффициент Ламе, $\mu_{\mathrm{el}}(\rho_1,\rho_2) > 0$ — второй коэффициент Ламе (модуль сдвига). Поскольку $\mathbf{E}$ симметричен, выражение (5.83) можно представить в виде

$$\begin{aligned}\psi_{\mathrm{el}}(\mathbf{C},\rho_1,\rho_2) &= \mu_{\mathrm{el}}\operatorname{tr}(\mathbf{E}^2) + \tfrac{1}{2}\lambda_{\mathrm{el}}(\operatorname{tr}\mathbf{E})^2 = \big(\mu_{\mathrm{el}} + \tfrac{1}{2}\lambda_{\mathrm{el}}\big)\mathrm{I}_1(\mathbf{E}) - \mu_{\mathrm{el}}\mathrm{I}_2(\mathbf{E})\\ &= \tfrac{1}{8}(2\mu_{\mathrm{el}} + \lambda_{\mathrm{el}})\big[\mathrm{I}_1(\mathbf{C}) - 3\big]^2 + \tfrac{1}{2}\mu_{\mathrm{el}}\big[2\mathrm{I}_1(\mathbf{C}) - \mathrm{I}_2(\mathbf{C}) - 3\big],\end{aligned} \tag{5.84}$$

где использованы очевидные формулы

$$\mathrm{I}_1(\mathbf{E}) = \tfrac{1}{2}\big[\mathrm{I}_1(\mathbf{C}) - 3\big], \quad \mathrm{I}_2(\mathbf{E}) = \tfrac{1}{4}\big[-2\mathrm{I}_1(\mathbf{C}) + \mathrm{I}_2(\mathbf{C}) + 3\big].$$

Далее, применяя формулы для производной свободной энергии по $\mathbf{C}$

$$\frac{\partial \mathrm{I}_1(\mathbf{C})}{\partial \mathbf{C}} = \mathbf{I}, \quad \frac{\partial \mathrm{I}_2(\mathbf{C})}{\partial \mathbf{C}} = \mathrm{I}_1(\mathbf{C})\,\mathbf{I} - \mathbf{C},$$

получаем

$$\partial_{\mathbf{C}}\psi = \partial_{\mathbf{C}}\psi_{\mathrm{el}} = \tfrac{1}{2}\mu_{\mathrm{el}}\mathbf{C} + \Big[\tfrac{1}{4}\lambda_{\mathrm{el}}\big(\mathrm{I}_1(\mathbf{C}) - 3\big) - \tfrac{1}{2}\mu_{\mathrm{el}}\Big]\mathbf{I}. \tag{5.85}$$

Подставляя производную (5.85) в выражение для равновесное тензора напряжений (3.51), получим

$$\mathbf{\Pi}_e = \rho\mathbf{B}\cdot\mathbf{B} + \rho\Big[\tfrac{1}{2}\lambda_{\mathrm{el}}\big(\mathrm{I}_1(\mathbf{C}) - 3\big) - \mu_{\mathrm{el}}\Big]\mathbf{B} - \mathbf{\Pi}_\lambda + p\mathbf{I},$$

где $\mathbf{B} := \mathbf{F}\cdot\mathbf{F}^{\mathrm{T}}$ — левый тензор деформации Коши–Грина (также известный как тензор Фингера), тензор капиллярных напряжений $\mathbf{\Pi}_\lambda$ задается выражением (5.82).

Список литературы

[1] Favrie N., Gavrilyuk S.L., Saurel R., Solid-fluid diffuse interface model in cases of extreme deformations // J. Comput. Phys. **228**(16), 6037–6077 (2009)

[2] Favrie N., Gavrilyuk S.L., Diffuse interface model for compressible fluid-compressible elastic-plastic solid interaction // J. Comput. Phys. **231**(7), 2695–2723 (2012) https://doi.org/10.1016/j.jcp.2011.11.027

[3] T. Wick, Fully Eulerian fluid–structure interaction for time-dependent problems // Comput. Methods. Appl. Mech. Eng., 2013, v. 255, pp. 14–26.

[4] Liu C., Walkington, N., An Eulerian description of fluids containing visco-elastic particles. // Arch. Rational Mech. Anal. **159**(3), 229–252 (2001) https://doi.org/10.1007/s002050100158

[5] Mokbel D., Abels H., Aland S., A phase-field model for fluid-structure interaction // J. Comput. Phys. **372**, 823–840 (2018) https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.06.063

[6] Armstrong R.T., Berg S., Dinariev O. et al., Modeling of Pore-Scale Two-Phase Phenomena Using Density Functional Hydrodynamics // Transp. Porous. Med. **112**(3) 577–607 (2016). https://doi.org/10.1007/s11242-016-0660-8

[7] Демьянов А.Ю., Динариев О.Ю., Евсеев Н.В., Основы метода функционала плотности в гидродинамике, ФИЗМАТЛИТ, 2009.

[8] Anderson D.M., McFadden G.B., Wheeler A.A., Diffuse-interface methods in fluid mechanics // Annu. Rev. Fluid Mech. **30**, 139–165 (1998) https://doi.org/10.1146/annurev.fluid.30.1.139

[9] Lowengrub J., Truskinovsky L., Quasi-incompressible Cahn–Hilliard fluids and topological transitions // Proc. Roy. Soc. Lond. Ser. A **454**, 2617–2654 (1998) https://doi.org/10.1098/rspa.1998.0273

[10] Provatas N., Elde K., Phase-field methods in material science and engineering, Willey-VCH, Weinheim, 2010.

[11] Dinariev O.Yu., Evseev N.V., Description of viscous-fluid flows with a moving solid phase in the density-functional theory // J. Eng. Phys. Thermophy. **80**(5), 918–926 (2007) https://doi.org/10.1007/s10891-007-0123-8

[12] Четверушкин Б.Н., Кинетические схемы и квазигазодинамическая система уравнений, МАКС Пресс, 2004.

[13] Шеретов Ю.В., Динамика сплошных сред при пространственно-временном осреднении, Регулярная и хаотическая динамика, 2009.

[14] Gurtin M.E., Generalized Ginzburg–Landau and Cahn–Hilliard equations based on a microforce balance // Physica D: Nonlinear Phenomena. **92** (3–4), 178–192 (1996) https://doi.org/10.1016/0167-2789(95)00173-5

[15] Liu J., Thermodynamically consistent modeling and simulation of multiphase flows, 2014, phd. dissertation.

[16] Fried E., Gurtin M.E., Continuum theory of thermally induced phase transitions based on an order parameter // Phisica D: Nonlinear Phenomena. **68** (3–4), 326–343 (1993) https://doi.org/10.1016/0167-2789(93)90128-N

[17] Gurtin M.E., Polignone D., Viñals J., Two-phase binary fluids and immiscible fluids described by an order parameter // Math. Models Methods Appl. Sci. **6** (6), 815–831 (1996) https://doi.org/10.1142/S0218202596000341

[18] Hennan D.L., Kamrin K., Continuum thermomechanics of the nonlocal granular rheology // Int. J. Plast. **60**, 145–162 (2014) https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2014.05.002

[19] Choo J., Sun W., Coupled phase-field and plasticity modeling of geological materials: From brittle fracture to ductile flow // Comput. Methods. Appl. Mech. Eng. **330**, 1–32 (2018) https://doi.org/10.1016/j.cma.2017.10.009

[20] Espath L.F.R., Sarmiento A.F., Dalcin L., Calo V.M., On the thermodynamics of the Swift–Hohenberg theory // Continuum Mech. Thermodyn. **29**(6), 1335–1345 (2017) https://doi.org/10.1007/s00161-017-0581-y

[21] Gurtin M.E., Fried E., Anand L., The mechanics and thermodynamics of continua. Cambridge University Press, Cambridge, 2010.

[22] Кондауров В.И., Фортов В.Е., Основы термомеханики конденсированной среды, МФТИ, 2002.

[23] Guermond J.-L., Popov B., Viscous regularization of the Euler equations and entropy principles // SIAM J. Appl. Math. **74**, 284–305 (2014) https://doi.org/10.1137/120903312

[24] Svärd M., A new eulerian model for viscous and heat conducting compressible flows // Phys. A **506**, 350–375 (2018) https://doi.org/10.1016/j.physa.2018.03.097

[25] Coleman B.D., Noll W., The thermodynamics of elastic materials with heat conduction and viscosity // Arch. Rational Mech. Anal. **13**(1), 167–178 (1963) https://doi.org/10.1007/BF01262690

[26] Tadmor E., Miller R., Elliott R., Continuum mechanics and thermodynamics: From fundamental concepts to governing equations. Cambridge University Press, Cambridge (2012)

[27] Балашов В.А., Савенков Е.Б., Многокомпонентная квазигидродинамическая модель для описания течений многофазной жидкости с учетом межфазного взаимодействия // Прикл. мех. техн. физ., **59**, № 3, с. 57–68 (2018)

[28] Liu J., Amberg G., Do-Quang M.m Diffuse interface method for a compressible binary fluid // Phys. Rev. E. **93**(1), 013121 (2016) https://doi.org/10.1103/PhysRevE.93.013121

[29] Zhao X., Wang Q., A second order fully-discrete linear energy stable scheme for a binary compressible viscous fluid model // J. Comput. Phys. **395**, 382–409 (2019) https://doi.org/10.1016/j.jcp.2019.06.030

[30] Gurtin M.E., Configurational Forces as Basic Concepts of Continuum Physics. Springer, New York (2000)

[31] Morro A., Phase-field models for fluid mixtures // Math. Comput. Modelling **45** (9–10) 1042–1052 (2007) https://doi.org/10.1016/j.mcm.2006.08.011

[32] Ganghoffer J.F., Rahouadj R., Boisse J., Schiavi J., A phase field approach for bone remodeling based on a second-gradient model // Mech. Res. Commun. **96** 37–44 (2019)

[33] Kondaurov V.I., Divergent form of the nonlinear thermoelasticity equations // J. Appl. Mech. Tech. Phys. **23** 427–434 (1982) https://doi.org/10.1007/BF00910088

[34] Елизарова Т. Г. Квазигазодинамические уравнения и методы расчета вязких течений, Научный мир, 2007.

[35] Гроот С. де, Мазур П. Неравновесная термодинамика, Мир, 1964.

[36] Liu J., Amberg G., Do-Quang M., Diffuse interface method for a compressible binary fluid // Phys. Rev. E. **93** (1) 013121 (2016) https://doi.org/10.1103/PhysRevE.93.013121

[37] Balashov V.A., Savenkov E.B., Regularized isothermal phase field model of two-component two-phase compressible fluid and its one-dimensional discritization // Diff. Equat. **56**(7) (2020)

[38] Chaves E.W.V., Notes on Continuum Mechanics. Series: Lecture Notes on Numerical Methods in Engineering and Sciences, vol. 4. Springer/CIMNE, Barcelona (2013)

[39] Димитриенко Ю.И., Нелинейная механика сплошной среды, ФИЗМАТ-ЛИТ, 2009.

Содержание