

СТРУКТУРА УРАВНЕНИЙ ПЕРЕНОСА ПРИ НАРУШЕНИИ УСЛОВИЯ ЛОКАЛЬНОГО РАВНОВЕСИЯ

Ю.К. Товбин

Научно-исследовательский физико-химический институт им. Л.Я.Карпова, Москва

Существующие теоретические подходы к кинетике физико-химических процессов в различных фазах основаны на методах химической кинетики, неравновесной термодинамики и кинетической теории. В качестве основного положения во всех перечисленных подходах принимается условие локального равновесия и малости отклонений от него при переходе к описанию процессов на макроскопическом уровне.

Классическими примерами интенсивных процессов и недостаточности использования только локальных средних скоростей переноса являются процессы формирования новой фазы, которые обычно протекают в сильнонеравновесных условиях в разных агрегатных состояниях (паре, жидкости или твердых телах), высокоэнергетические химические реакции, процессы горения и взрыва, турбулентные течения, химические реакции в турбулентных потоках, процессы в твердых телах (механохимия и деструкция), коррозионные процессы в деформированных материалах, и т.д..

Сформулирована структура уравнений переноса массы, импульса и энергии в сильно-неравновесных условиях, когда нарушается традиционное допущение неравновесной термодинамики – условие локального равновесия. Уравнения переноса строятся в рамках микроскопической гидродинамики развитой в модели решеточного газа. Потоки массы, импульса и энергии описываются на атомно-молекулярном уровне с помощью неравновесных дискретных унарных и бинарных функций распределений с учетом межчастичных потенциальных взаимодействий компонентов системы.

Получено, что полная система локальных уравнений переноса состоит из 5 модифицированных уравнений переноса массы, импульса и энергии для каждого из узлов системы и из 15 новых уравнений, описывающих коррелированные характеристики плотности, скорости и температуры в узлах рассматриваемой пары частиц.

Построенные уравнения переноса, сформулированы для пространственно неоднородных систем с произвольной плотностью вещества, т.е. для трех агрегатных состояний вещества и границ раздела их фаз.

Обсуждается связь построенных уравнений с предшествующими работами по теории неравновесных потоков в гидродинамике и кинетической теории.