

ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ
ГОСУДАРСТВЕННОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ»

Е.Н. Коржов

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКАЯ МЕХАНИКА

Учебное пособие

Издательско-полиграфический центр
Воронежского государственного университета
2009

1. КРАТКИЙ ОБЗОР НЕКОТОРЫХ НАПРАВЛЕНИЙ РАЗВИТИЯ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКОЙ МЕХАНИКИ: ИСТОРИЧЕСКИЙ ОЧЕРК

В начале XXI века одной из характерных особенностей развития науки и техники является все большая степень интеграции различных их разделов вместе с широким внедрением тех или иных элементов информационных технологий. Последний факт является важным обстоятельством, отмечаемым не только в механике, но и других областях знаний.

В механике, как и в большинстве естественных наук, еще с середины прошлого века интенсивное развитие получили так называемые «пограничные» области знаний. Термин «пограничные» выражает существенную особенность, заключающуюся в том, что основная масса исследований выполняется, как правило, на стыке наук. Вместе с тем следует отметить, что такого рода исследования выполнялись в науке уже достаточно давно. По крайней мере, в области механики подобного рода исследования относят к началу прошлого века, когда были получены существенные результаты с привлечением теории или эксперимента при учете разнообразных физических взаимодействий или химических превращений.

Так, например, известная *задача Стефана* о поведении систем, состоящих из твердых и жидких сред, при замерзании или отвердевании и обратные им явления (таяние, плавление) была сформулирована и успешно решена еще в 1891 году. В течение XX века была развита целая относительно самостоятельная область механики для систем с подвижными границами и фазовыми переходами. В настоящее время прямые и обратные задачи по-прежнему широко изучаются в связи с многочисленными и разнообразными приложениями. Большое внимание уделяется задачам с промежуточным фазовым состоянием, называемым иногда «мягким» слоем. Такие задачи весьма актуальны в металлургии, химической промышленности, биологии и медицине, в исследованиях, связанных с изучением поведения ледников (больших массивов льда и снега) и мн. др.

К середине XX века у нас в стране и за рубежом формируются коллективы и группы специалистов по различным направлениям исследований в области физико-химической механики. Создаются специальные лаборатории в Институте механики Академии наук (в настоящее время Институт проблем механики РАН), институте механики Московского университета, в институтах Сибирского отделения АН СССР (Институт гидродинамики, Институт теоретической и прикладной механики, организуется даже самостоятельный академический Институт механики многофазных систем (г. Тюмень)) и в других научных центрах. Многочисленные шаги по расширению фронта исследований в области физико-химической механики предпринимаются в различных государствах. Безусловно, ведущими здесь яв-

2. ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ, ПРЕДСТАВЛЕНИЯ, ОПРЕДЕЛЕНИЯ И УРАВНЕНИЯ

Механика есть наука об изменении со временем взаимного положения в пространстве материальных объектов и их силовом взаимодействии между собой и окружающей средой.

Уточняя это понятие, в классической механике оговаривается, что такими объектами могут быть любые материальные тела, кроме элементарных частиц, атомов или молекул. Поведение этих микрочастиц является предметом исследования в специальных разделах физики – *молекулярной физике* и *квантовой механике*. Второе существенное ограничение – быстрота перемещения материальных объектов осуществляется со скоростями намного меньше скорости света. Если скорость движения материальных объектов становится соизмеримой со скоростью света, то такого рода движения изучаются в *теории относительности*.

В механике, как ни в какой другой науке, основным методом исследования является математическое моделирование. Все материальные объекты, которые изучает механика, представляются в виде некоторых их аналогов или отображений, называемых моделями. Принято выделять следующие основные типы моделей: материальная точка, система материальных точек, абсолютно твердое тело, сплошная среда или их комбинации.

Если движение или взаимодействия реальных материальных объектов характеризуются какими-либо физическими или химическими превращениями или взаимодействиями, то такого рода движения и взаимодействия составляют предмет исследования *физико-химической механики*.

Под физическими превращениями и взаимодействиями понимают фазовые переходы из одного агрегатного состояния в другое, разнообразные явления и эффекты в многофазных системах, тепло- и массообмен в однородных и неоднородных средах, взаимодействие материальных объектов с электромагнитными полями и многое другое [3, 5, 7, 10]. Основные закономерности собственно физических взаимодействий изучаются в *физической кинетике*, поэтому данный раздел науки рассматривается как одна из базовых составляющих физико-химической механики.

К числу химических взаимодействий относятся любые процессы, включая химические реакции, в результате которых одни вещества возникают, а другие исчезают. Это такие процессы, как горение, окисление и восстановление веществ, ионный обмен и мн. др. Законы и закономерности химических превращений составляют предмет исследования *химической кинетики* [3, 4, 7, 9]. Естественно, что её результаты так же входят, как основной составляющий элемент, в физико-химическую механику.

Таким образом, можно определить **физико-химическую механику** как раздел механики, изучающий перемещение и взаимодействие материальных объектов с учетом физических или химических взаимодействий.

Существуют и другие точки зрения на предмет физико-химической механики, прежде всего в кругу специалистов в области коллоидной химии. Представляется, что такая точка зрения является несколько ограниченной, сужающей область исследования этого раздела науки.

Следует также понимать различия в предмете исследования, подходах и методах изучения реальных явлений, принятых в физико-химической механике, и отдельных частных науках, тесным образом развивающихся совместно и с многочисленными проявлениями взаимного влияния друг на друга. Так, например, физико-химическая механика исследует процессы горения, которые составляют основу одноименной теории. Однако между подходами, применяемыми методами и средствами существуют, по крайней мере, в настоящее время, и вполне определенные отличия. Если теория горения основное внимание уделяет собственно механизму осуществления этого процесса, влиянию потоков жидкости или газа на процесс горения, то физико-химическая механика, прежде всего, обращает внимание на такие стороны, как построение соответствующих математических моделей, влияние реакций горения на динамику потока, изменение распределенных и интегральных динамических характеристик от параметров химических реакций и т. д. Поэтому было бы неправильным противопоставлять эти две науки или пытаться навязать методологию одного раздела науки другому. Наоборот, следует стремиться к более полному использованию результатов одной науки в другой, не подменяя предмет исследования каждой из них, а развивать его, делать все более разнообразным по форме и более глубоким по содержанию.

И еще одна особенность физико-химической механики – постоянное обобщение результатов в различных частных науках и разработка наиболее общих моделей, а также подходов и методов решения полученных математических задач и их применение в прикладных исследованиях. Так, например, динамика пузырька применяется при изучении самых разнообразных процессов и явлений – кавитации, металлургии (продувка металла), производстве полимерных изделий, технологиях пищевой промышленности, двигателестроении, системах с полупроницаемыми мембранами и пористыми электродами (топливные элементы), геологических исследованиях и прочее.

Основные принципы построения математических моделей для теоретических исследований в области физико-химической механики базируются на основе фундаментальных законов природы, а также тех законов и закономерностей, которые установлены в конкретной предметной области. Та-

кой методологический подход может быть признан наиболее корректным с точки зрения общей теории моделирования.

Первую группу уравнений, на базе которых строятся математические модели распределенных систем, в том числе физико-химического континуума, составляют уравнения, получаемые из фундаментальных законов природы или естествознания. К числу таких фундаментальных постулатов относятся законы баланса массы, импульса или количества движения, момента импульса и внутренней энергии [3, 10–13].

В наиболее общем виде их можно записать таким образом:

1. Уравнение неразрывности, получаемое из закона сохранения массы [3],

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0, \quad (2.1)$$

где ρ – плотность среды; \mathbf{v} – вектор скорости; t – время.

2. Уравнение движения континуума или сплошной среды [3]

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right) = \nabla \cdot \mathbf{P} + \rho \mathbf{f}, \quad (2.2)$$

где \mathbf{P} – тензор напряжений; \mathbf{f} – плотность массовых сил.

3. Уравнение баланса момента импульса [3]

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{k}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{k} \right) = \nabla \cdot \mathbf{M} + \rho \mathbf{l} + \mathbf{P} \cdot \times \mathbf{I}. \quad (2.3)$$

Здесь \mathbf{k} – вектор внутреннего момента импульса; \mathbf{M} – тензор моментных напряжений; \mathbf{l} – массовая плотность распределенных моментов; \mathbf{I} – единичный тензор.

4. Уравнение для температуры, если процессы неизотермические и происходят в несжимаемой среде [3],

$$\rho c_v \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla T \right) = -\nabla \cdot \mathbf{q} + \mu \mathbf{D} + Q. \quad (2.4)$$

Для многокомпонентных или многофазных систем, которые представляют собой жидкие или газообразные смеси, требуется использовать соответствующее уравнение для концентрации

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla c_i = -\nabla \cdot \mathbf{J}_i + \kappa_i, \quad (2.5)$$