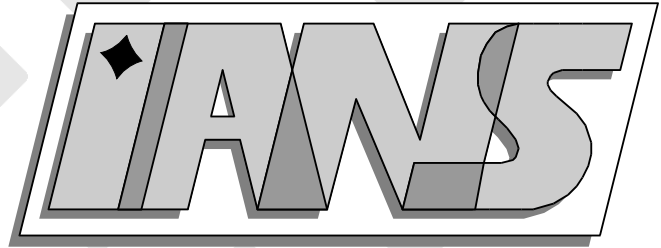


**Universität
Stuttgart**



**Mathematische Modelle für
Mehrkomponentenströmungen**

R. Bürger

**Berichte aus dem Institut für
Angewandte Analysis und Numerische Simulation**

Vorlesungsskript 2003/017

Universität Stuttgart

Mathematische Modelle für
Mehrkomponentenströmungen

R. Bürger

**Berichte aus dem Institut für
Angewandte Analysis und Numerische Simulation**

Vorlesungsskript 2003/017

Institut für Angewandte Analysis und Numerische Simulation (IANS)
Fakultät Mathematik und Physik
Fachbereich Mathematik
Pfaffenwaldring 57
D-70 569 Stuttgart

E-Mail: ians-preprints@mathematik.uni-stuttgart.de
WWW: <http://preprints.ians.uni-stuttgart.de>

ISSN **1611-4176**

© Alle Rechte vorbehalten. Nachdruck nur mit Genehmigung des Autors.
IANS-Logo: Andreas Klimke. \LaTeX -Style: Winfried Geis, Thomas Merkle.

Inhaltsverzeichnis

Vorwort	7
Kapitel 1. Klassische Kontinuumstheorie	9
1.1. Vorbemerkungen: Physikalische Realität, Korpuskular- und Kontinuumsmodell	9
1.2. Kinematik	13
1.3. Bilanzgleichungen	14
1.4. Sprungbedingungen	20
1.5. Beobachterunabhängigkeit und Objektivität	21
1.6. Bemerkungen über konstitutive Gleichungen	23
1.7. Darstellungssätze	23
1.8. Thermodynamische Prozesse	24
1.9. Flüssigkeiten und Festkörper	26
Kapitel 2. Bilanzgleichungen für Mehrkomponentenströmungen	31
2.1. Mehrkomponentenmischungen	31
2.2. Kinematik	32
2.3. Bilanzgleichungen	32
2.4. Mehrkomponenten-Entropieungleichungen	37
2.5. Mischungsgleichungen	41
Kapitel 3. Mittelungstheorie	45
3.1. Zusammenfassung der lokalen Erhaltungsgleichungen	45
3.2. Mathematische Grundlagen der Ensemblemittelung	46
3.3. Resultate der Ensemble-Mittelung	49
Kapitel 4. Alternative Mittelungen	55
4.1. Mehrpartikel-Verteilungsfunktionen	56
4.2. Volumenmittelung	64
Kapitel 5. Gemittelte Gleichungen	69
5.1. Mittelung von Bilanzgleichungen	69
5.2. Definition gemittelter Variablen	70
5.3. Gemittelte Bilanzgleichungen	73
Kapitel 6. Modellierung von Mehrkomponentenströmungen	77
6.1. Vollständigkeit der Formulierung	77
6.2. Konstitutive Gleichungen	77

6.3. Formen der konstitutiven Gleichungen	80
6.4. Entropierestriktionen	82
Kapitel 7. Bewegungsgleichungen für eine niedrig konzentrierte Strömung	89
7.1. Konstitutive Gleichungen	89
7.2. Bewegungsgleichungen	96
Literaturverzeichnis	99

Vorwort

Das vorliegende Vorlesungsmanuskript entstand aus handschriftlichen Unterlagen zu einer Vorlesung, die im Wintersemester 2002/03 am Institut für Angewandte Analysis und Numerische Simulation (IANS) der Universität Stuttgart gehalten wurde. An dieser Stelle danke ich Herrn cand. math. Till Brönnle, jetzt FU Berlin, für die sorgfältige mehrfache Durchsicht des Skriptes.

Stuttgart, im September 2003

Raimund Bürger

Klassische Kontinuumstheorie

1.1. Vorbemerkungen: Physikalische Realität, Korpuskular- und Kontinuumsmodell

Wir betrachten einen Körper \mathcal{B} zu einem Zeitpunkt t und bezeichnen mit \mathbf{x} Punkte im physikalischen Raum. Dieser Körper wird durch eine Abbildung χ in das physikalische Raumgebiet abgebildet, und wir bezeichnen mit \mathbf{x} genaue Raumpositionen, die als Bild dieser Abbildung auftreten. Um dem Punkt \mathbf{x} formal eine Massendichte zuzuordnen zu können, bezeichnen wir mit $b(\mathbf{x}, r)$ eine Kugel um \mathbf{x} mit Radius r . Wir bezeichnen mit V das Volumen und mit M die Masse, so daß z.B. $V(b(r, \mathbf{x}))$ das Volumen der Kugel vom Radius r mit Mittelpunkt \mathbf{x} darstellt. Wir betrachten nun das Verhalten der Funktion

$$R(r, \mathbf{x}) := \frac{M(b(r, \mathbf{x}))}{V(b(r, \mathbf{x}))}.$$

In einem *Kontinuumsmodell* kann ein Körper beliebig in kleinere Teile zerlegt werden, die in einem bestimmten Sinne mit dem Körper selbst identisch sind. Die Massendichte ρ an einem Punkt \mathbf{x} in \mathcal{B} ist dann definiert als

$$\rho(\mathbf{x}) = \lim_{r \rightarrow 0^+} \frac{M(b(r, \mathbf{x}))}{V(b(r, \mathbf{x}))}. \quad (1.1)$$

Wir nehmen an, daß für ein Kontinuum die Masse eine absolutstetige Funktion des Volumens ist, so daß die Funktion $\rho(\mathbf{x})$ fast überall definiert ist. Die Dichte hat die Eigenschaft

$$m(\mathcal{B}) = \int_{\chi(\mathcal{B})} \rho(\mathbf{x}) \, dv,$$

wobei $\chi(\mathcal{B})$ die Konfiguration des Körpers \mathcal{B} zum Zeitpunkt t ist.

Ein ‘Korpuskularmodell’ kann wie folgt beschrieben werden. Wir nehmen an, das Innere des Körpers \mathcal{B} sei größtenteils leer, und wir nehmen an, daß die gerade betrachtete Konfiguration von \mathcal{B} eine geeignet definierte Oberfläche besitze. Dann besteht eine typische Annahme darin, daß es eine relativ gleichmäßig verteilte, endliche Menge von Teilkörpern kleinen, aber endlichen Volumens gibt, in denen die gesamte Masse konzentriert ist. Noch weiter geht die Annahme, daß die Masse kein Volumen einnimmt, sondern nur in ‘Massenpunkten’ vorliegt. In diesem Fall gibt es Werte r , für die R sich unstetig ändert.

Für abnehmendes r hat die Funktion $R(r, \mathbf{x})$ im allgemeinen folgendes Verhalten. Für große Werte r ist das Verhalten von R nicht vorhersagbar, da makroskopische Massenänderungen in das Referenzvolumen eingehen. Dann gibt es einen Bereich, etwa $\underline{r} < r < \bar{r}$, in dem R in etwa konstant bleibt. Dieser konstante Wert wird mit der Massendichte $\rho(\mathbf{x})$

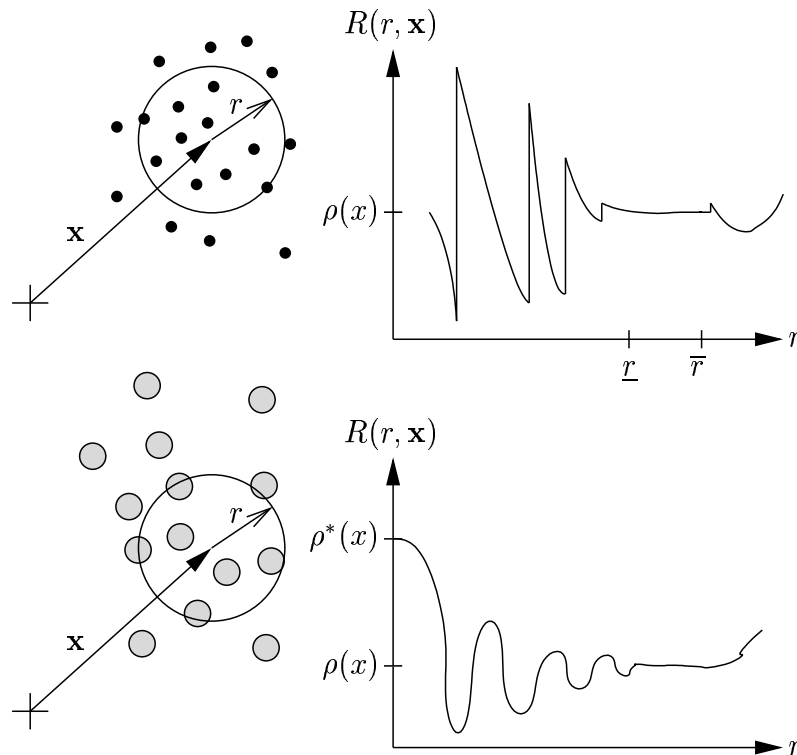


ABBILDUNG 1.1. Verhältnisse Masse zu Volumen für Punktmassen (oben) und identische Kugeln endlicher Größe (unten).

der Kontinuumstheorie identifiziert. Für noch kleinere Werte r , also $r < \underline{r}$, oszilliert R auf folgende Weise. Solange r so abnimmt, daß die Oberfläche der Kugel b keinen der Massenpunkte passiert, nimmt die ‘Dichte’ R zu, und der Zähler ändert sich nicht. An einem Wert r , an dem ein Massenpunkt verloren geht, da sich der Radius der Kugel verkleinert, ändert sich die Masse sprunghaft, während sich das Volumen kontinuierlich ändert. An solchen Werten r sinkt die Dichte abrupt. Schließlich nimmt r einen derart kleinen Wert an, daß für alle kleineren Werte r und fast überall in \mathcal{B} die Kugel b keine Massenpunkte enthält. Das heißt, daß R dann gegen Null geht. Ist jedoch \mathbf{x} ein Punkt, an dem eine Punktmasse konzentriert ist, dann enthält die Kugel für hinreichend kleinen Radius genau eine Punktmasse, und die Masse bleibt für alle kleineren Radien konstant, während das Volumen auf Null schrumpft. Für diese Punkte geht R nicht gegen Null, sondern gegen unendlich, siehe Abbildung 1.1.

Der Falle eines Körpers \mathcal{B} mit Teilkörpern endlichen Volumens und gleichförmiger Dichte $\bar{\rho}$, wie oben definiert, ist für die Untersuchung heterogener Medien interessant. Der hier nützliche Dichtebegriff wird wie in der vorangehenden Diskussion definiert. In diesem Fall besteht das Ergebnis darin, daß der Grenzwert von Masse pro Volumeneinheit für fast alle

\mathbf{x} existiert, und durch

$$\rho^*(x) := \lim_{r \rightarrow 0} R(r, \mathbf{x}) = \begin{cases} 0 & \text{falls } \mathbf{x} \text{ au\ss}erhalb \text{ aller Teilk\o}rper \text{ liegt,} \\ \bar{\rho} & \text{falls } \mathbf{x} \text{ in einem der Teilk\o}rper \text{ liegt} \end{cases}$$

gegeben ist.

Dieser Grenzwert ist jedoch nicht die Massendichte ρ des K\o}rpers, die sich f\ur einen homogenen K\o}rper durch Messungen ergeben w\urde; ferner ist die Funktion $\rho^*(\mathbf{x})$ nicht glatt. Nach dieser Korpuskulartheorie ist der Wert von r , f\ur den $\rho^* = R(r, \mathbf{x})$ gilt, so klein im Vergleich zu den typischen Abmessungen eines Anfangs-Randwertproblems, da\ss f\ur den praktischen Gebrauch der Feldgleichungen $\rho^*(\mathbf{x})$ fast \u00berall keine Ableitung besitzt. Ferner geht diese Eigenschaft auch auf viele andere der interessierenden Felder \u00ber.

In dieser Vorlesung besteht unser prinzipielles Interesse darin, lokale Bewegungsgleichungen und Randbedingungen so zu erzeugen, da\ss l\o}sbare (Anfangs-) Randwertprobleme entstehen. Daher m\ussten wir davon ausgehen, da\ss Grenzwerte wie (1.1) existieren. Die resultierenden Funktionen m\ussten hinreichend glatt sein, soda\ss die resultierenden Bewegungsgleichungen umgeformt werden k\o}nnen. Eine hinreichende Bedingung hierf\ur ist durch folgendes Lemma gegeben.

Lemma 1.1 (Dubois-Reymond). *Ist eine Funktion f stetig auf einem Gebiet D und gilt f\ur jedes glatt berandete Teilgebiet $\bar{D} \subset D$*

$$\int_{\bar{D}} f(\mathbf{x}) \, dv = 0,$$

so folgt $f(\mathbf{x}) = 0$.

Soll dieses Argument rigoros angewendet werden, so m\ussten die verwendeten Gr\o}ssen den Limes $r \rightarrow 0$ zulassen.

Nach landl\au}ufiger Meinung gibt die Korpuskulartheorie das wahre Bild der Realit\at wieder, w\ahrend der Kontinuumsansatz einer Idealisierung entspricht. Dies ist ein problematischer Standpunkt. Um dies zu verdeutlichen, k\o}nnten wir zum Beispiel $R(r, \mathbf{x}) = \text{const.}$ f\ur $r < \bar{r}$ annehmen und

$$\rho(\mathbf{x}) = \lim_{r \rightarrow \bar{r}} R(r, \mathbf{x})$$

annehmen. Bei diesem Grenzwert ist jedoch unklar, ob er \u00berall in $\chi(\mathcal{B})$ existiert, und ob \bar{r} in bezug auf $\chi(\mathcal{B})$ gleichm\ai}ig ist. Vor allem aber ist dieser Grenzwert mit der Differentialrechnung unvertr\aglich.

Um einen Ausweg aufzuzeigen, gehen wir davon aus, da\ss die exakten Orte der Punktmassen unbekannt oder sogar prinzipiell unbestimmbar sind. Wir betrachten dann den K\o}rper mit Punktmassen an bestimmten Positionen als eine bestimmte *Realisierung* in einem *Ensemble* von Ereignissen, die alle als Beschreibung der Bewegung des K\o}rpers gleichwertig sind. Wir definieren dann $\rho^*(\mathbf{x})$ als *Mittel* oder *Erwartungswert* des Verh\altnisses von Masse zu Volumen. Ist μ eine bestimmte Realisierung, so sei

$$R(r, \mathbf{x}; \mu) = \frac{M(b(r, \mathbf{x}), \mu)}{V(b(r, \mathbf{x}))}. \quad (1.2)$$

Damit erhalten wir den Erwartungswert durch Mittelung, das heißt, wir multiplizieren (1.2) mit der Wahrscheinlichkeit der Realisierung von μ und ‘summieren’ über alle möglichen Realisierungen:

$$\overline{R}(r, \mathbf{x}) := \int_{\mathcal{E}} R(r, \mathbf{x}; \mu) dm(\mu).$$

Damit lautet die Definition der ‘mittleren Dichte’

$$\bar{\rho}(\mathbf{x}) = \lim_{r \rightarrow 0} \overline{R}(r, \mathbf{x}).$$

Die *Glattheit* von $\bar{\rho}(\cdot)$ hängt vom Ensemble und den relativen Wahrscheinlichkeiten der Realisierung der Elemente des Ensembles ab. Sind die Punkte gleichförmig verteilt, dann ist auch $\bar{\rho}(\cdot)$ gleichförmig, also glatt; besteht \mathcal{E} aus nur einer einzigen Realisierung, dann wird die so erhaltene ‘mittlere Dichte’ mit der vorhin verworfenen übereinstimmen, und eine vernünftige Kontinuumstheorie kann aus der Korpuskulartheorie nicht aufgebaut werden.

Sei nun $f(\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_N)$ die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion für die Mittelpunkte von N Kugeln vom Einheitsradius 1 mit der Dichte ρ_s . Nimmt man an, daß sich die Kugeln nicht überlappen, dann ist die Dichte gegeben durch

$$\rho_s \left(H(1 - |\mathbf{x} - \mathbf{z}_1|) + H(1 - |\mathbf{x} - \mathbf{z}_2|) + \dots + H(1 - |\mathbf{x} - \mathbf{z}_N|) \right),$$

wobei $H(\cdot)$ die übliche Heaviside-Funktion mit

$$H(y) = \begin{cases} 1 & \text{für } y \geq 0, \\ 0 & \text{für } y < 0 \end{cases}$$

ist und somit gilt:

$$H(1 - |\mathbf{x} - \mathbf{z}_i|) = \begin{cases} 1 & \text{falls } |\mathbf{x} - \mathbf{z}_i| \leq 1, \\ 0 & \text{sonst,} \end{cases} \quad i = 1, \dots, N.$$

Die mittlere Dichte ist dann

$$\bar{\rho}(\mathbf{x}) = \rho_s \underbrace{\int \dots \int}_N f(\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_N) \left(\sum_{j=1}^N H(1 - |\mathbf{x} - \mathbf{z}_j|) \right) d\mathbf{z}_1 \dots d\mathbf{z}_N.$$

Das mehrdimensionale Integral zeigt an, daß sich die Kugeln nicht überlappen. Wir differenzieren formal partiell nach x_i und nehmen an, der gerade betrachtete Punkt \mathbf{x} sei in der Nähe von \mathbf{z}_j . Dann gilt

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \bar{\rho}(\mathbf{x}) = \rho_s \int \dots \int f(\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_N) \frac{\partial}{\partial x_i} \left(H(1 - |\mathbf{x} - \mathbf{z}_j|) \right) d\mathbf{z}_1 \dots d\mathbf{z}_N.$$

Hier muß man natürlich vorsichtig sein, denn die Heaviside-Funktion kann nicht ohne weiteres differenziert werden. Man muß diese Ableitung als verallgemeinerte Funktion auffassen. Partielle Integration liefert hier

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \bar{\rho}(\mathbf{x}) = -\rho_s \int \dots \int \left(\frac{\partial}{\partial x_i} (f(\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_N)) \right) H(1 - |\mathbf{x} - \mathbf{z}_j|) d\mathbf{z}_1 \dots d\mathbf{z}_N.$$

Dies zeigt, daß die Glattheit von $\bar{\rho}$ von der der Verteilungsfunktion f abhängt. Hat f glatte Ableitungen, dann hat auch $\bar{\rho}(\mathbf{x})$ glatte Ableitungen entsprechender Ordnungen, obwohl die exakte Dichte unstetig ist. Ferner hat $\bar{\rho}(\mathbf{x})$ die Eigenschaft, daß

$$m(\mathcal{B}) = \int_{\chi(\mathcal{B})} \bar{\rho}(\mathbf{x}) dv(\mathcal{B})$$

die Masse des ‘Körpers’ \mathcal{B} ist. Der Begriff des ‘Körpers’ bezieht sich hier auf eine Folge von Körpern, jeder in unterschiedlichen Realisierungen, die das Volumen $\chi(\mathcal{B}) = b(r, \mathbf{x})$ ausfüllen.

In der Praxis ist es extrem schwierig, ein brauchbares Kontinuumsmodell aus einer korpuskularen Theorie herzuleiten. Die *kinetische Theorie* ist ein korpuskulares Modell für ein Gas, und die *Navier-Stokes-Gleichungen* sind ein Kontinuumsmodell für dasselbe Material. Diese Theorien gehören zu den einfachsten ihrer Art, und sie stimmen gut, aber nicht perfekt überein. Will man z.B. die Viskosität eines Gases aus der kinetischen Theorie herleiten, so erhält man zwar nützliche tendenzielle Abhängigkeiten von Druck und Temperatur, aber nur unter stark einschränkenden Bedingungen Übereinstimmung mit experimentellen Daten. Dennoch sind beide Ansätze nützlich.

1.2. Kinematik

Wir betrachten einen Körper \mathcal{B} als eine Menge von Partikeln, die zu jedem Zeitpunkt in ein abgeschlossenes Gebiet des dreidimensionalen physikalischen Raumes abgebildet werden können. Ferner bezeichne \mathbf{x} den Ort im physikalischen Raum, t die Zeit, \mathbf{X} den Ort von Partikeln in der Referenzkonfiguration (hier der Einfachheit halber: den Ort der Partikel in der Konfiguration zum Zeitpunkt 0). Hierbei sind \mathbf{X} und \mathbf{x} keine Koordinaten, sondern Positionen. Es ist aber auch üblich, \mathbf{X} als *materielle* oder *Lagrangesche* und \mathbf{x} als *räumliche* oder *Eulersche* Koordinaten zu bezeichnen. Eine *Bewegung* ist dann eine glatte Abbildung $\mathbf{x} = \chi(\mathbf{X}, t)$ mit $\mathbf{X} = \chi(\mathbf{X}, 0)$; diese definiert eine *Geschwindigkeit*

$$\mathbf{V}(\mathbf{X}, t) := \frac{\partial \chi(\mathbf{X}, t)}{\partial t}$$

in materieller oder Lagrangescher Form. Ist χ invertierbar, so kann die Geschwindigkeit auch als Funktion von \mathbf{x} und t geschrieben werden. Dann gilt

$$\mathbf{V}(\mathbf{X}, t) = \mathbf{v}(\chi(\mathbf{X}, t), t), \quad \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{V}(\chi^{-1}(\mathbf{x}, t), t).$$

Die Geschwindigkeit ist dann in räumlicher Form oder Eulersch.

Wir führen ferner die *Beschleunigung*

$$\mathbf{A} := \frac{\partial \mathbf{V}(\mathbf{X}, t)}{\partial t}$$

ein. Diese kann auch in räumlicher Form geschrieben werden. Es ist daher zweckmäßiger, denselben Buchstaben für eine Größe in beiden Formen zu verwenden.

Für Zeitableitungen führen wir

$$\mathbf{a} := \frac{D\mathbf{v}}{Dt} \equiv \dot{\mathbf{v}}$$

als materielle Ableitung ein, wenn \mathbf{X} konstant ist; ist \mathbf{v} zum Beispiel in räumlichen Koordinaten gegeben, dann ist

$$\mathbf{a} = \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v},$$

wobei ∇ der Gradient in bezug auf die räumlichen Koordinaten ist.

Der *Geschwindigkeitsgradient* $\nabla \mathbf{v}$ ist in vielen Kontinuumstheorien von Interesse. Sein *symmetrischer Anteil*

$$\mathbf{D} := \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T)$$

heißt *Deformationsrate* (oder *Deformationsgeschwindigkeitstensor*, *Streckgeschwindigkeitstensor*), und sein *schiefsymmetrischer Anteil*

$$\mathbf{W} := \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{v} - (\nabla \mathbf{v})^T)$$

ist der *Drehgeschwindigkeitstensor* oder *Spintensor*. Offenbar gilt $\nabla \mathbf{v} = \mathbf{D} + \mathbf{W}$; ferner ist diese Zerlegung eindeutig.

1.3. Bilanzgleichungen

1.3.1. Massenbilanz. Wir bezeichnen mit $\chi(\mathcal{B}, t)$ das dreidimensionale Raumgebiet, das vom Körper \mathcal{B} zum Zeitpunkt t ausgefüllt wird. Ein Maß auf der Konfiguration von \mathcal{B} ist das *Volumen* $v_\chi(\mathcal{B}, t)$. Die *Masse* $m(\mathcal{B})$ wird als absolutstetig in bezug auf das Volumen betrachtet. Dann folgt aus dem Satz von Radon-Nikodym die Existenz einer *Dichte* genannten Größe ρ mit

$$m(\chi(\bar{\mathcal{B}}, t)) = \int_{\chi(\bar{\mathcal{B}}, t)} \rho \, dv \quad \text{für alle Teilmengen } \bar{\mathcal{B}} \subset \mathcal{B}. \quad (1.3)$$

Die *Massenerhaltung* besagt dann:

$$\frac{d}{dt} m(\chi(\mathcal{B}, t)) = 0. \quad (1.4)$$

Man beachte, daß wir diese Gleichung als *Postulat* einführen. Andere Postulate sind möglich, etwa für einzelne Komponenten reagierender Mischungen. Aus (1.3) folgt

$$\frac{d}{dt} \int_{\chi(\mathcal{B}, t)} \rho \, dv = 0 \quad \text{für alle Teilmengen } \bar{\mathcal{B}} \subset \mathcal{B}. \quad (1.5)$$

Zur Überführung dieser Gleichung in lokale Form beachten wir, daß die Transformation von χ_0 nach χ durch die Jacobi-Matrix beschrieben wird, d.h. es gibt eine Größe J (die Funktionaldeterminante) mit

$$\int_{\chi(\mathcal{B}, t)} \rho \, dv = \int_{\chi_0(\mathcal{B}, t)} \rho J \, dv_0. \quad (1.6)$$

Die Funktionaldeterminante J drückt eine lokale Beziehung zwischen Punkten der Konfiguration $\boldsymbol{\chi}(\mathcal{B}, t)$ und entsprechenden Punkten der Konfiguration $\boldsymbol{\chi}_0(\mathcal{B}, t)$ aus. Setzen wir (1.6) in (1.5) ein, so folgt

$$\frac{d}{dt} \int_{\boldsymbol{\chi}(\mathcal{B}, t)} \rho \, dv = \frac{d}{dt} \int_{\boldsymbol{\chi}_0(\mathcal{B})} \rho J \, dv_0 = \int_{\boldsymbol{\chi}_0(\mathcal{B})} (\dot{\rho} J + \rho \dot{J}) \, dv_0 = 0. \quad (1.7)$$

Nach dem Lemma von Dubois-Reymond muß der Integrand verschwinden, also

$$\dot{\rho} J + \rho \dot{J} = 0. \quad (1.8)$$

Dies ist die *materielle* oder *Lagrangesche* Form der Massenerhaltung. Integration liefert

$$\rho J = \text{const.} \quad (1.9)$$

Für die materielle Ableitung von J gilt folgendes. Das Volumen von \mathcal{B} zur Zeit t ist gegeben durch

$$V_{\boldsymbol{\chi}}(\bar{\mathcal{B}}, t) = \int_{\boldsymbol{\chi}(\bar{\mathcal{B}}, t)} dv \quad \text{für alle } \bar{\mathcal{B}} \subset \mathcal{B}. \quad (1.10)$$

Dann können wir mit der obigen Transformationsregel schreiben:

$$V_{\boldsymbol{\chi}}(\bar{\mathcal{B}}, t) = \int_{\boldsymbol{\chi}_0(\bar{\mathcal{B}})} \det \boldsymbol{\chi} \, dv_0 = \int_{\boldsymbol{\chi}_0(\bar{\mathcal{B}})} J \, dv_0 \quad \text{für alle } \bar{\mathcal{B}} \subset \mathcal{B}. \quad (1.11)$$

Damit gilt

$$\frac{d}{dt} V_{\boldsymbol{\chi}}(\bar{\mathcal{B}}, t) = \int_{\boldsymbol{\chi}_0(\bar{\mathcal{B}})} \dot{J} \, dv_0 \quad \text{für alle } \bar{\mathcal{B}} \subset \mathcal{B}. \quad (1.12)$$

Mit der Eulerschen Entwicklungsgleichung für die materielle Ableitung von J (siehe [15])

$$\dot{J} = J \nabla \cdot \mathbf{v} \quad (1.13)$$

folgt durch Einsetzen in $\dot{\rho} J + \rho \dot{J} = 0$:

$$\dot{\rho} + \rho \nabla \cdot \mathbf{v} = 0. \quad (1.14)$$

Wir leiten nun die *räumliche* oder *Eulersche* Form der Massenbilanz her. Es gilt:

$$\dot{\rho} = \frac{\partial \rho(\mathbf{X}, t)}{\partial t} = \frac{\partial \rho(\boldsymbol{\chi}(\mathbf{X}, t))}{\partial t} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{d\boldsymbol{\chi}}{dt} \cdot \nabla \rho = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \rho.$$

Dies ist die *materielle Ableitung* von ρ . Im letzten Ausdruck treten nur Größen auf, die von der räumlichen Variablen \mathbf{x} abhängen. Daher lautet die gesuchte *räumliche* oder *Eulersche* Form der Massenbilanz:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \rho + \rho \cdot \nabla \mathbf{v} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0. \quad (1.15)$$

1.3.2. Impulsbilanz. Wir betrachten zunächst zwei Kraftbegriffe, die totale *Volumenkraft*

$$\mathcal{F}_b = \int_{\chi(\mathcal{B}, t)} \rho \mathbf{b} dv \quad (1.16)$$

mit der Volumenkraft pro Einheitsmasse \mathbf{b} und die *Oberflächenkraft*

$$\mathcal{F}_s = \oint_{\partial\chi(\mathcal{B}, t)} \mathbf{t} ds \quad (1.17)$$

mit dem *Spannungsvektor* \mathbf{t} . Der *Impuls* von $\chi(\mathcal{B}, t)$ ist gegeben durch

$$\mathcal{M} = \int_{\chi(\mathcal{B}, t)} \rho \mathbf{v} dv. \quad (1.18)$$

Verwenden wir die Massenerhaltung, so folgt folgende Gleichung für die materielle Ableitung $d\mathcal{M}/dt$:

$$\frac{d\mathcal{M}}{dt} = \int_{\chi(\mathcal{B}, t)} \rho \dot{\mathbf{v}} dv(\mathcal{B}). \quad (1.19)$$

Die Impulsbilanz wird nun in der Form

$$\frac{d\mathcal{M}}{dt} = \mathcal{F}_b + \mathcal{F}_s \quad (1.20)$$

postuliert, d.h. die Impulsänderungsrate eines Körpers ist gleich der Summe aller auf ihn einwirkenden Kräfte. Ist $\chi(\cdot, \cdot)$ hinreichend glatt und betrachten wir hinreichend ‘glatte’ Teilkörper $\bar{\mathcal{B}}$, dann kann gezeigt werden, daß fast überall in $\chi(\mathcal{B}, t)$ ein Tensor \mathbf{T} existiert mit

$$\mathbf{t} = \mathbf{n} \cdot \mathbf{T}, \quad (1.21)$$

wobei \mathbf{n} der äußere Einheitsnormalenvektor an $\partial\chi(\mathcal{B}, t)$ ist.

Zur Skizzierung der wesentlichen Idee, die (1.21) zugrunde liegt, betrachten wir einen kleinen Körper mit der größten Ausdehnung l . Dann sind die Volumenintegrale $\mathcal{O}(l^3)$, die Oberflächenintegrale $\mathcal{O}(l^2)$. Damit sind für hinreichend kleine Körper Oberflächenintegrale vernachlässigbar. Wir betrachten nun eine ‘Scheibe’, bei der eine Dimension viel kleiner ist als die beiden anderen (Abb. 1.2), so daß die kleinere Dimension parallel zu einem gegebenen äußeren Einheitsnormalenvektor \mathbf{n} ist. Dann gilt

$$\int_{\mathcal{S}} (\mathbf{t}(\mathbf{n}^+) + \mathbf{t}(\mathbf{n}^-)) ds = 0.$$

Dabei ist $\mathbf{n}^+ = \mathbf{n}$ und $\mathbf{n}^- = -\mathbf{n}$. Da die Oberfläche \mathcal{S} dieser Scheibe beliebig ist, folgt $\mathbf{t}(\mathbf{n}) = -\mathbf{t}(-\mathbf{n})$.

Wir betrachten nun einen tetraederförmigen Körper (Abbildung 1.3). Geht die Größe des Tetraeders gegen Null, so werden die Volumenintegrale gegenüber dem Oberflächenintegral vernachlässigbar und es gilt

$$0 = \int_{\mathcal{S}_n} \mathbf{t}(\mathbf{n}) ds + \int_{\mathcal{S}_1} \mathbf{t}(-\mathbf{e}_1) ds + \int_{\mathcal{S}_2} \mathbf{t}(-\mathbf{e}_2) ds + \int_{\mathcal{S}_3} \mathbf{t}(-\mathbf{e}_3) ds. \quad (1.22)$$

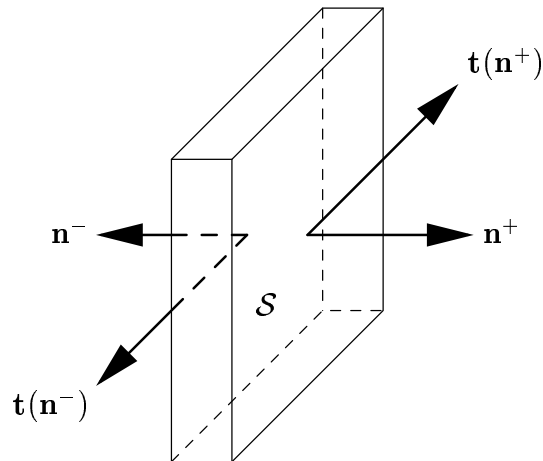


ABBILDUNG 1.2. "Scheibe" zum Beweis von (1.21).

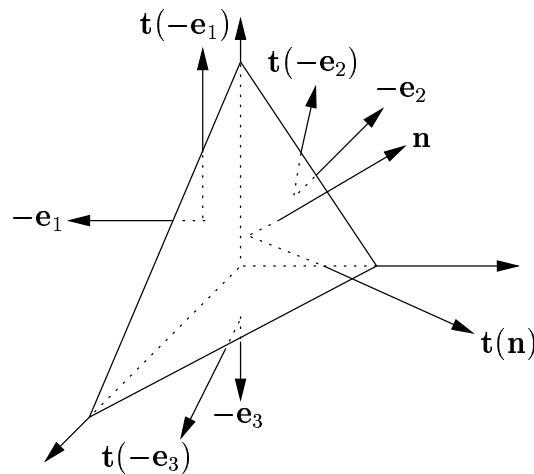


ABBILDUNG 1.3. Tetraederförmiger Körper zum Beweis von (1.21).

Es gilt $\mathbf{t}(-\mathbf{e}_1) = -\mathbf{t}(\mathbf{e}_1)$, $\mathbf{t}(-\mathbf{e}_2) = -\mathbf{t}(\mathbf{e}_2)$ und $\mathbf{t}(-\mathbf{e}_3) = -\mathbf{t}(\mathbf{e}_3)$ und somit $\mathcal{S}_1 = \mathcal{S}_{\mathbf{n}}(\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{n})$, $\mathcal{S}_2 = \mathcal{S}_{\mathbf{n}}(\mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{n})$ und $\mathcal{S}_3 = \mathcal{S}_{\mathbf{n}}(\mathbf{e}_3 \cdot \mathbf{n})$. Wenden wir den Mittelwertsatz der Integralrechnung auf (1.22) an, so folgt

$$\mathbf{t}(\mathbf{n}) = (\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_1)\mathbf{t}(\mathbf{e}_1) + (\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_2)\mathbf{t}(\mathbf{e}_2) + (\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_3)\mathbf{t}(\mathbf{e}_3).$$

Damit ist der Spannungsvektor \mathbf{t} *linear* in \mathbf{n} und definiert somit einen Spannungstensor \mathbf{T} durch

$$\mathbf{T} = \mathbf{e}_1\mathbf{t}(\mathbf{e}_1) + \mathbf{e}_2\mathbf{t}(\mathbf{e}_2) + \mathbf{e}_3\mathbf{t}(\mathbf{e}_3);$$

somit gilt $\mathbf{t} = \mathbf{n} \cdot \mathbf{T}$. Das Ergebnis (natürlich unter Glattheitsvoraussetzungen) ist, daß die Abhängigkeit von der Schnittrichtung linear von \mathbf{n} abhängt. In genauer Notation lautet

(1.21) also $\mathbf{t}(\mathbf{x}; t, \mathbf{n}) = \mathbf{n} \cdot \mathbf{T}(\mathbf{x}, t)$. Damit gilt für die am Rand eines Körpers angreifenden Kräfte:

$$\mathcal{F}_s = \oint_{\partial\chi(\mathcal{B},t)} \mathbf{n} \cdot \mathbf{T} ds$$

und somit nach einer Anwendung des Divergenzsatzes

$$\mathcal{F}_s = \int_{\chi(\mathcal{B},t)} \nabla \cdot \mathbf{T} dv.$$

Damit hat die Impulsbilanz die Form

$$\int_{\chi(\mathcal{B},t)} \rho \dot{\mathbf{v}} dv = \int_{\chi(\mathcal{B},t)} (\rho \mathbf{b} + \nabla \cdot \mathbf{T}) dv.$$

Wie bei den Argumenten für die Massenbilanz verwenden wir nun, daß $\chi(\mathcal{B}, t)$ beliebig ist, und erhalten die *lokale Form der Impulsbilanz* (oder *Bewegungsgleichung*)

$$\rho \dot{\mathbf{v}} = \rho \mathbf{b} + \nabla \cdot \mathbf{T}. \quad (1.23)$$

Die materielle Ableitung auf der linken Seite von (1.23) zeigt an, daß diese Gleichung in materieller (Lagrangescher) Form ist. Die Gradienten sind jedoch weiterhin ‘räumlich’, da sie sich auf die Variable \mathbf{x} beziehen. (Sie können durch

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \mathbf{x}} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{X}}$$

transformiert werden.) Die *Eulersche* oder *räumliche* Form der Impulsbilanz ist

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right) = \rho \mathbf{b} + \nabla \cdot \mathbf{T}.$$

1.3.3. Drehimpuls- oder Drallbilanz. Wir betrachten zwei verschieden Arten, den Drehimpuls zu bilanzieren. Der Gesamtvolumendrehimpuls, der auf einen Körper in der Konfiguration $\chi(\mathcal{B}, t)$ wirkt, ist

$$\mathcal{T}_b = \int_{\chi(\mathcal{B},t)} \boldsymbol{\tau} dv.$$

Wir betrachten nur nichtpolare Medien, für welche

$$\mathcal{T}_b = \int_{\chi(\mathcal{B},t)} \rho \mathbf{x} \times \mathbf{b} dv$$

gilt. Wir nehmen ferner an, $\chi(\mathcal{B}, t)$ besitze Oberflächendrehmomente. Dann gilt

$$\mathcal{T}_s = \oint_{\partial\chi(\mathcal{B},t)} \mathbf{x} \times \mathbf{t} ds.$$

Der *Drehimpuls* (oder *Drall*; *moment of momentum*) von \mathcal{B} ist

$$\mathcal{N} = \int_{\chi(\mathcal{B},t)} \rho \mathbf{x} \times \mathbf{v} dv.$$

Um die materielle Ableitung zu berechnen, transformieren wir den Integranden in die Referenzkonfiguration χ_0 und verwenden $\mathbf{v} \times \mathbf{v} = 0$. Es folgt

$$\frac{d\mathcal{N}}{dt} = \int_{\chi(\mathcal{B},t)} \rho \mathbf{x} \times \dot{\mathbf{v}} dv = \int_{\chi(\mathcal{B},t)} \rho \mathbf{x} \times (\nabla \cdot \mathbf{T} + \rho \mathbf{b}) dv.$$

Wir postulieren hier die Bilanzgleichung

$$\frac{d\mathcal{N}}{dt} = \mathcal{T}_b + \mathcal{T}_s.$$

Die auf den Rand von \mathcal{B} einwirkenden Drehmomente sind

$$\mathcal{T}_s = \oint_{\partial\chi(\mathcal{B},t)} \mathbf{n} \cdot (\mathbf{x} \times \mathbf{T}) ds.$$

Daraus folgt mit einer Anwendung des Divergenzsatzes

$$\mathcal{T}_s = \int_{\chi(\mathcal{B},t)} (\text{vec } \mathbf{T} + \mathbf{x} \times \nabla \cdot \mathbf{T}) dv.$$

Hierbei ist $\text{vec } \mathbf{T}$ der Vektor mit $\mathbf{W}\mathbf{v} = \text{vec } \mathbf{T} \times \mathbf{v}$ für alle \mathbf{v} , auch *Achsenvektor* genannt. Nun gilt

$$\mathcal{T}_s = \frac{d\mathcal{N}}{dt} - \mathcal{T}_b = \int_{\chi(\mathcal{B},t)} \mathbf{x} \times (\nabla \cdot \mathbf{T} + \rho \mathbf{b}) dv - \int_{\chi(\mathcal{B},t)} \rho \mathbf{x} \times \mathbf{b} dv.$$

Es folgt somit

$$\int_{\chi(\mathcal{B},t)} \text{vec } \mathbf{T} dv = 0$$

und damit aufgrund der Beliebigkeit von \mathcal{B} : $\text{vec } \mathbf{T} = 0$, also $\mathbf{T} = \mathbf{T}^T$.

1.3.4. Energiebilanz. Wir bezeichnen mit u die innere Energie in \mathcal{B} pro Einheitsmasse, \mathbf{q} den Wärmestromvektor pro Einheitsfläche durch den Rand von \mathcal{B} und mit r den Wärmezuwachs pro Einheitsmasse und Zeiteinheit in \mathcal{B} . Die postulierte Energiebilanz lautet nun

$$\frac{d}{dt} \int_{\chi(\mathcal{B},t)} \rho \left(u + \frac{1}{2} v^2 \right) dv = \oint_{\partial\chi(\mathcal{B},t)} \mathbf{n} \cdot (-\mathbf{q} + \mathbf{T} \cdot \mathbf{v}) ds + \int_{\chi(\mathcal{B},t)} \rho (r + \mathbf{b} \cdot \mathbf{v}) dv,$$

d.h. die Änderungsrate der totalen Energie von \mathcal{B} ist gleich der von den mechanischen Kräften geleisteten Arbeit und der durch Erwärmung verursachten Energierate. Umformungen ähnlich den Impulsbilanzen liefern die Energieerhaltung in materiellen Koordinaten:

$$\rho \dot{u} = \mathbf{T} : \mathbf{D} - \nabla \cdot \mathbf{q} + \rho r$$

und in räumlichen Koordinaten

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u \mathbf{v}) = -\nabla \cdot \mathbf{q} + \rho r + \mathbf{T} : \nabla \mathbf{v},$$

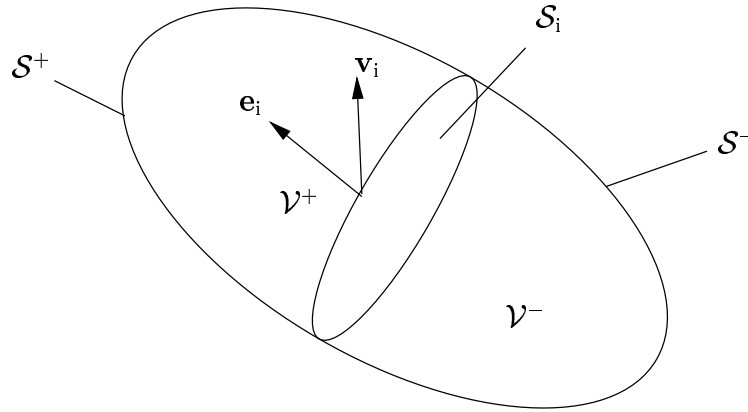


ABBILDUNG 1.4. Zur Herleitung der Sprungbedingung.

wobei “:” das doppelte Skalarprodukt bezeichnet. Eine weitere Form kann hergeleitet werden, wenn man den Spannungstensor in einen Druck p und einen viskosen Spannungstensor $\boldsymbol{\tau}$ zerlegt, also $\mathbf{T} = -p\mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}$, und die *Enthalpie*

$$h := u + \frac{p}{\rho}$$

einführt. Man erhält dann die *Enthalpiegleichung*

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho h \mathbf{v}) = -\nabla \cdot \mathbf{q} + \left(\frac{\partial p}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla p \right) + \boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{v} + \rho r.$$

1.4. Sprungbedingungen

Bisher haben wir die Bilanzgleichungen in differentieller Form angegeben. Diese Gleichungen gelten natürlich nur dann, wenn die Felder glatt sind. Treten Unstetigkeiten auf, so bleiben die Bilanzen für Körper gültig. Wir nehmen an, die einzige interessante Unstetigkeit sei eine über eine glatte Fläche hinweg, die Gebiete trennt, in denen die Felder glatt sind.

Wir betrachten die Massenbilanz für ein zylindrisches Volumen, das eine Teilmenge der Sprungfläche enthalte. Dann gilt

$$\frac{d}{dt} \int_{\boldsymbol{\chi}(\mathcal{B}, t)} \rho \, dv = - \oint_{\partial \boldsymbol{\chi}(\mathcal{B}, t)} \rho (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) \, ds. \quad (1.24)$$

Hieraus folgt die Massen-Sprungbedingung (oder *Rankine-Hugoniot-Bedingung*)

$$(\rho^+ (\mathbf{v}^+ - \mathbf{v}_i) - \rho^- (\mathbf{v}^- - \mathbf{v}_i)) \cdot \mathbf{e}_i = 0, \quad (1.25)$$

wobei wir mit “+” und “-” die Grenzwerte einer Größe zu beiden Seiten der Unstetigkeit bezeichnen und \mathbf{e}_i der Einheitsnormalenvektor der Sprungfläche ist. Um zu zeigen, daß

(1.25) gilt, betrachten wir die Abbildung 1.4. In der Referenzkonfiguration gilt

$$\int_{\mathcal{V}^+} \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) \right) dv + \int_{\mathcal{V}^-} \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) \right) dv = 0.$$

Da die Sprungfläche nicht materiell, also räumlich ist, folgt:

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{V}^+} \frac{\partial \rho}{\partial t} dv + \int_{S^+} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} ds + \int_{S_i} \rho^+ (\mathbf{v}^+ - \mathbf{v}_i) \cdot (-\mathbf{e}_i) ds \\ + \int_{\mathcal{V}^-} \frac{\partial \rho}{\partial t} dv + \int_{S^-} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} ds + \int_{S_i} \rho^- (\mathbf{v}^- - \mathbf{v}_i) \cdot \mathbf{e}_i ds = 0. \end{aligned}$$

Damit gilt

$$\int_{\mathcal{V}} \frac{\partial \rho}{\partial t} dv + \int_S \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} ds = \int_{S_i} (\rho^+ (\mathbf{v}^+ - \mathbf{v}_i) - \rho^- (\mathbf{v}^- - \mathbf{v}_i)) \cdot \mathbf{e}_i ds.$$

Die linke Seite ist wegen (1.24) gleich Null, wir erhalten daher

$$\int_{S_i} (\rho^+ (\mathbf{v}^+ - \mathbf{v}_i) - \rho^- (\mathbf{v}^- - \mathbf{v}_i)) \cdot \mathbf{e}_i ds = 0.$$

Bezeichnen wir mit $[[\cdot]]$ einen Sprung, also $[[G]] := G^+ - G^-$, so folgt

$$\int_{S_i} [[\rho(\mathbf{v} - \mathbf{v}_i) \cdot \mathbf{e}_i]] ds = 0;$$

hieraus erhalten wir die lokale Sprungbedingung

$$[[\rho(\mathbf{v} - \mathbf{v}_i) \cdot \mathbf{e}_i]] = 0$$

oder mit $\sigma := \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{e}_i$:

$$\sigma = \frac{[[\rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{e}_i]]}{[[\rho]]},$$

also gerade die Rankine-Hugoniot-Bedingung. Analog erhalten wir folgende Sprungbedingungen für Impuls und Energie:

$$\begin{aligned} [[(\rho \mathbf{v}(\mathbf{v} - \mathbf{v}_i) + \mathbf{T})]] \cdot \mathbf{n} &= \mathbf{m}_i^\sigma, \\ [[\rho \left(u + \frac{1}{2} v^2 (\mathbf{v} - \mathbf{v}_i) \right) + (\mathbf{T} \cdot \mathbf{v} - \mathbf{q})]] \cdot \mathbf{n} &= \varepsilon_i^\sigma. \end{aligned}$$

1.5. Beobachterunabhängigkeit und Objektivität

Der Begriff des ‘Rahmens’ ist intuitiv. Wir bezeichnen mit \mathbf{x} den ‘Ort \mathbf{x} , wie er im Bezugssystem \mathcal{I} beobachtet wird’ usw., ohne daß die Tatsache der Beobachtungen in die mathematische Formulierung eingeht. Änderungen von Bezugssystemen $\mathcal{I} \rightarrow \mathcal{I}^*$ werden eingeführt durch $t^* = t + a$ und

$$\mathbf{x}^* = \mathbf{x}_0^* + \mathbf{Q}(t)(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0).$$

Hierbei ist $a \in \mathbb{R}$ und \mathbf{Q} ein orthogonaler Tensor, d.h. $\mathbf{Q}\mathbf{Q}^T = \mathbf{I}$. Der Tensor \mathbf{Q} kann eine Rotation, aber auch eine Spiegelung darstellen.

Wir berechnen nun das Verhalten einiger kinematischer Größen unter einem Bezugssystemwechsel und betrachten zunächst die Geschwindigkeit. Es gilt

$$\dot{\mathbf{x}}^* = \dot{\mathbf{x}}_0^* + \dot{\mathbf{Q}}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) + \mathbf{Q}(\dot{\mathbf{x}} - \dot{\mathbf{x}}_0).$$

Wegen $\dot{\mathbf{Q}}\mathbf{Q}^T + \mathbf{Q}\dot{\mathbf{Q}}^T = 0$ und somit

$$\dot{\mathbf{Q}}\mathbf{Q}^T = -(\mathbf{Q}\dot{\mathbf{Q}}^T) = -(\dot{\mathbf{Q}}\mathbf{Q}^T)^T$$

ist $\dot{\mathbf{Q}}\mathbf{Q}^T$ schiefsymmetrisch, und mit $\mathbf{A} = \dot{\mathbf{Q}}\mathbf{Q}^T$ gilt

$$(\dot{\mathbf{x}}^* - \dot{\mathbf{x}}_0^*) = \mathbf{Q}(\dot{\mathbf{x}} - \dot{\mathbf{x}}_0) + \mathbf{A}(\mathbf{x}^* - \mathbf{x}_0^*). \quad (1.26)$$

Das analoge Resultat für Beschleunigungen ist

$$(\ddot{\mathbf{x}}^* - \ddot{\mathbf{x}}_0^*) = \mathbf{Q}(\ddot{\mathbf{x}} - \ddot{\mathbf{x}}_0) + (\dot{\mathbf{A}} - \mathbf{A}^2)(\mathbf{x}^* - \mathbf{x}_0^*). \quad (1.27)$$

Für Funktionen, die aus der Abbildung einer Partikelposition entstehen, kann man das Verhalten unter dem Wechsel des Beobachters angeben. Aus (1.26) folgt

$$\mathbf{v}^*(\mathbf{x}^*, t^*) = \mathbf{Q}\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) + \mathbf{A}(\mathbf{x}^* - \mathbf{x}_0^*). \quad (1.28)$$

Wir bilden nun den Gradienten von (1.28). Der Gradient ∇^* bezüglich \mathbf{x}^* ist natürlich ein anderer als der bezüglich \mathbf{x} . Es gilt

$$\nabla^* \mathbf{v}^* = \mathbf{Q} \cdot \nabla \mathbf{v} \cdot \mathbf{Q}^T + \mathbf{A}.$$

Da die Zerlegung eines Tensors in einen symmetrischen und einen schiefsymmetrischen Anteil eindeutig ist, folgt

$$\mathbf{D}^* = \mathbf{Q}\mathbf{D}\mathbf{Q}^T, \quad \mathbf{W}^* = \mathbf{Q}\mathbf{W}\mathbf{Q}^T + \mathbf{A}.$$

Hierbei ist \mathbf{D} die Deformationsrate und \mathbf{W} der Rotationstensor. Ferner betrachten wir die Deformation $\mathbf{x} = \boldsymbol{\chi}(\mathbf{X}, t)$. Für $\mathbf{F} := \nabla_{\mathbf{X}}\boldsymbol{\chi}$ gilt $\mathbf{F}^* = \mathbf{Q}\mathbf{F}$.

In einigen Gebieten der Mechanik spielen Verzerrungen eine Rolle. Hierzu gehören die linken bzw. rechten Cauchy-Green-Tensoren $\mathbf{C} = \mathbf{F}^T\mathbf{F}$ und $\mathbf{B} = \mathbf{F}\mathbf{F}^T$. Wir untersuchen nun deren Verhalten unter einem Wechsel des Beobachters und erhalten

$$\mathbf{C}^* = \mathbf{F}^{*T}\mathbf{F}^* = \mathbf{F}^T\mathbf{Q}^T\mathbf{Q}\mathbf{F} = \mathbf{F}^T\mathbf{F} = \mathbf{C},$$

$$\mathbf{B}^* = \mathbf{Q}\mathbf{B}\mathbf{Q}^T.$$

Die Deformationsrate \mathbf{D} (oder "Verzerrungsrate") kann nicht aus \mathbf{F} , \mathbf{B} oder \mathbf{C} durch elementare Differentiation gewonnen werden. Das Verhalten von Größen, die nicht direkt aus der Deformationsfunktion $\boldsymbol{\chi}$ unter Änderungen des Beobachters hergeleitet werden, kann i.a. nicht abgeleitet werden; vielmehr müssen diese Größen definiert werden.

Ein Skalar $f = f(\mathbf{x}, t)$ heißt *objektiv*, falls $f^* = f$ gilt; ein Vektor \mathbf{u} heißt *objektiv*, falls $\mathbf{u}^* = \mathbf{Q}\mathbf{u}$, und ein Tensor heißt *objektiv*, wenn er objektive Vektoren auf objektive Vektoren abbildet, d.h. $\mathbf{T}^*\mathbf{u}^* = \mathbf{Q}\mathbf{T}\mathbf{u}$ für alle \mathbf{u} . Damit gilt $\mathbf{T}^*\mathbf{Q}\mathbf{u} = \mathbf{Q}\mathbf{T}\mathbf{u}$ für alle \mathbf{u} und somit $\mathbf{T}^* = \mathbf{Q}\mathbf{T}\mathbf{Q}^T$. Demnach ist \mathbf{B} objektiv, \mathbf{C} aber nicht.

1.6. Bemerkungen über konstitutive Gleichungen

Konstitutive Gleichungen geben die interne Verteilung von Impuls und Energie an. Sie haben häufig die Form $\mathbf{T} = T(\rho, \boldsymbol{\chi}, u)$ und $\mathbf{q} = Q(\rho, \boldsymbol{\chi}, u)$, wobei T und Q Funktionale der Bewegung und der Zustandsvariablen sind. Viele Materialien hängen aber nur vom Materialzustand im Körper in der Nähe des Punktes \mathbf{x} ab. Sie führen daher auf Abhängigkeiten $\mathbf{T}(\mathbf{x}, t) = \hat{T}(\mathcal{S})$ und $\mathbf{q}(\mathbf{x}, t) = \hat{Q}(\mathcal{S})$, wobei der Zustand \mathcal{S} durch

$$\mathcal{S} = \left\{ \rho(\mathbf{x}, t), \boldsymbol{\chi}(\mathbf{X}, t), u(\mathbf{x}, t), \rho_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}, t), \boldsymbol{\chi}_t(\mathbf{X}, t), \boldsymbol{\chi}_{\mathbf{x}}(\mathbf{X}, t), u_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}, t), \dots \right\}$$

gekennzeichnet ist; "...“ deutet an, daß auch noch höhere Ableitungen auftreten können.

Prinzip der Beobachterunabhängigkeit. Die konstitutiven Gleichungen sind gewissen Beschränkungen aufgrund von Invarianzargumenten unterworfen. Insbesondere müssen sie gegenüber Beobachterwechseln invariant sein, d.h. das Materialverhalten darf nicht vom Beobachter abhängen. Das heißt, daß eine Variable, die konstitutiv als Funktion der Zustandsvariablen beschrieben wird, auf beobachterunabhängige Weise von diesen Zustandsvariablen abhängen muß. Diese Variablen müssen selbst vom Koordinatensystem unabhängig, also objektiv sein.

1.7. Darstellungssätze

In der Theorie der Mehrkomponentenströmungen treten eine Reihe skalar-, vektor- und tensorwertiger Funktionen von Skalaren, Vektoren und Tensoren auf. Diese Funktionen sollen wieder beobachterunabhängig sein. Eine allgemeine Theorie dieser Funktionen ist recht kompliziert und wir verweisen z.B. auf [12] für Einzelheiten. Ein solches Ergebnis teilen wir hier mit.

Satz 1.1. *Ist \mathbf{M} eine beobachterunabhängige, vektorwertige Funktion der Skalare s_1, \dots, s_j , der objektiven Vektoren $\mathbf{V}_1, \dots, \mathbf{V}_n$ und der objektiven symmetrischen Tensoren $\mathbf{T}_1, \dots, \mathbf{T}_m$, dann besitzt \mathbf{M} folgende Darstellung:*

$$\mathbf{M} = \sum_{i=1}^n A_i \mathbf{V}_i + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m B_{ij} \mathbf{V}_i \cdot \mathbf{T}_j,$$

wobei A_i und B_j Funktionen der Skalare s_1, \dots, s_j und der unabhängigen skalaren Invarianten sind, die aus $\mathbf{V}_1, \dots, \mathbf{V}_n$ und $\mathbf{T}_1, \dots, \mathbf{T}_m$ gebildet werden. Diese skalaren Invarianten sind Teilmengen von $\mathbf{V}_i \cdot \mathbf{V}_j$, $\mathbf{V}_i \cdot \mathbf{T}_j \cdot \mathbf{V}_k$, $\mathbf{V}_i \cdot \mathbf{T}_j \mathbf{T}_k \cdot \mathbf{V}_l$ und \mathbb{I}_m , \mathbb{II}_m und \mathbb{III}_m , wobei die skalaren Invarianten eines kartesischen Tensors gegeben sind durch

$$\mathbb{I}_m := T_{m_{ii}} \equiv \sum_{i=1}^3 T_{m_{ii}}, \quad \mathbb{II}_m := \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 (T_{m_{ii}} T_{m_{jj}} - T_{m_{ij}} T_{m_{ji}}), \quad \mathbb{III}_m := \det(T_{m_{ij}}).$$

Ist ferner \mathbf{R} eine beobachterunabhängige symmetrische Tensorfunktion derselben Größen, so muß gelten

$$\mathbf{R} = \sum_{i=1}^m C_i \mathbf{T}_i + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m D_{ij} \mathbf{V}_i \mathbf{V}_j + \sum_{i,j=1}^n \sum_{k,l=1}^m E_{ijkl} (\mathbf{V}_i \cdot \mathbf{T}_k \mathbf{V}_j \cdot \mathbf{T}_l + \mathbf{V}_j \cdot \mathbf{T}_l \mathbf{V}_i \cdot \mathbf{T}_k),$$

wobei C_i , D_{ij} und E_{ijkl} Funktionen der Skalare und der oben definierten skalaren Invarianten sind.

1.8. Thermodynamische Prozesse

Wir definieren die *Entropie* pro Einheitsmasse $s(\mathbf{X}, t)$ und die Temperatur $\theta(\mathbf{X}, t)$. Hiermit postulieren wir die *Entropiebilanz*

$$\frac{d}{dt} \int_{\chi(\mathcal{B}, t)} \rho s \, dv \geq \int_{\chi(\mathcal{B}, t)} \frac{\rho r}{\theta} \, dv - \oint_{\partial\chi(\mathcal{B}, t)} \frac{\mathbf{q} \cdot \mathbf{n}}{\theta} \, ds$$

oder in lokaler Form

$$\rho \dot{s} \geq \frac{\rho r}{\theta} - \nabla \cdot \left(\frac{1}{\theta} \mathbf{q} \right).$$

Formal kann ein thermodynamischer Prozeß wie folgt definiert werden. Wir betrachten eine Abbildung von \mathcal{B} auf ein räumliches Gebiet $\chi_0(\mathcal{B})$ und betrachten die räumliche Position von \mathbf{X} : $\mathbf{x} = \chi(\mathbf{X}, t)$, den (symmetrischen) Spannungstensor $\mathbf{T}(\mathbf{X}, t)$, die Volumenkraft $\mathbf{b}(\mathbf{X}, t)$, die innere Energie $e(\mathbf{X}, t)$, den Wärmestromvektor $\mathbf{q}(\mathbf{X}, t)$, die Wärmequelle $r(\mathbf{X}, t)$, die Entropie $s(\mathbf{X}, t)$ und die Temperatur $\theta(\mathbf{X}, t)$ mit $\theta > 0$. Diese 8 Funktionen bilden einen *thermodynamischen Prozeß*, falls die Impuls- und Energiebilanzen gelten:

$$\rho \dot{\mathbf{v}} = \rho \mathbf{b} + \nabla \cdot \mathbf{T}, \quad \rho \dot{e} = \mathbf{T} : \mathbf{D} - \nabla \cdot \mathbf{q} + \rho r \quad \text{für alle } t \text{ und } \mathbf{X} \in \chi_0(\mathcal{B}).$$

Wir betrachten nun speziell ein elastisches Fluid mit Wärmeleitung und Viskosität. Ein Prozeß heißt *zulässig* in einem Körper aus einem solchen Material, falls folgende Gleichungen an allen \mathbf{X} und t gelten:

$$e = \hat{e}(\rho, s), \quad \theta = \hat{\theta}(\rho, s), \quad \mathbf{T} = -\hat{p}(\rho, s)\mathbf{I} + \hat{\mathbf{C}}(\rho, s) : \mathbf{D}, \quad \mathbf{q} = \hat{\mathbf{q}}(\rho, s, \nabla\theta).$$

Hierbei ist $\hat{\mathbf{C}}$ ein Tensor 4. Stufe; in kartesischen Koordinaten gilt also

$$T_{ij} = -p\delta_{ij} + \hat{C}_{ijkl}D_{kl}.$$

Nun müssen wir unser Postulat der Entropiebilanzgleichung anwenden. Setzen wir die Energiebilanz in die Entropiegleichung ein, so folgt

$$\rho\theta\dot{s} - \rho\dot{e} + \mathbf{T} : \mathbf{D} - \frac{\mathbf{q} \cdot \nabla\theta}{\theta} \geq 0. \quad (1.29)$$

Wir wählen aus der Klasse aller zulässigen Prozesse diejenigen aus, die durch homogene Dichten und Entropieverteilungen gekennzeichnet sind. Dann folgt $\rho = \rho(t)$ und $s = s(t)$. Damit gilt wegen $\theta = \hat{\theta}(\rho, s)$ auch $\nabla\theta = 0$. Dann folgt aus (1.29)

$$\rho \left(\theta\dot{s} - \frac{\partial\hat{e}}{\partial s}\dot{s} - \frac{\partial\hat{e}}{\partial\rho}\dot{\rho} \right) - p\nabla \cdot \mathbf{v} + \mathbf{D} : \hat{\mathbf{C}} : \mathbf{D} \geq 0.$$

Wegen der Massenerhaltung gilt $\dot{\rho} = -\rho\nabla \cdot \mathbf{v}$ und daher

$$\rho \left(\theta - \frac{\partial\hat{e}}{\partial s} \right) \dot{s} + \rho^2 \left(\frac{\partial\hat{e}}{\partial s} - \frac{p}{\rho^2} \right) \nabla \cdot \mathbf{v} + \mathbf{D} : \hat{\mathbf{C}} : \mathbf{D} \geq 0. \quad (1.30)$$

Als Funktionen der Zeit können ρ und s beliebig gewählt werden. Für einen bestimmten Zeitpunkt können ρ , s , $\dot{\rho}$ und \dot{s} beliebige Werte zugewiesen werden. Wählen wir $\mathbf{D} = 0$ in (1.30), so folgt, daß

$$\left(\theta - \frac{\partial \hat{e}}{\partial s}\right) \dot{s} \geq 0$$

für alle s gelten muß; folglich muß gelten:

$$\theta = \hat{\theta}(\rho, s) = \frac{\partial \hat{e}}{\partial s}(\rho, s).$$

Wählen wir nun $\dot{s} = 0$ und ersetzen wir \mathbf{D} in (1.30) durch $\alpha \mathbf{D}$, $\alpha \in \mathbb{R}$ beliebig, so folgt

$$\alpha \rho^2 \left(\frac{\partial \hat{e}}{\partial \rho} - \frac{p}{\rho^2}\right) \nabla \cdot \mathbf{v} + \alpha^2 \mathbf{D} : \hat{\mathbf{C}} : \mathbf{D} \geq 0.$$

Diese Ungleichung muß für alle α gelten, wenn ρ , s und \mathbf{D} fest sind. Das gilt genau dann, wenn der Koeffizient von α verschwindet und der von α^2 nichtnegativ ist. Somit erhalten wir die Druckrelation

$$p = \rho^2 \frac{\partial \hat{e}}{\partial \rho}$$

und folgende Dissipationsungleichung, die für alle symmetrischen Tensoren \mathbf{D} gelten muß:

$$\mathbf{D} : \hat{\mathbf{C}} : \mathbf{D} \geq 0. \quad (1.31)$$

Wir nehmen an, die Temperaturbeziehung lasse sich nach der Entropie auflösen. Dies ist keine triviale Annahme; eine Bedingung dafür, daß dies möglich ist, ist, daß e für jedes feste ρ eine konvexe Funktion der Entropie s ist. Dann gilt $s = \check{s}(\rho, \theta)$. Wir nehmen weiterhin eine feste homogene Referenzkonfiguration an und betrachten homogene und zeitkonstante Deformationen, d.h. $\nabla \boldsymbol{\chi} = \text{const.}$ Dann ist jede solche Deformation durch einen einzigen Wert von ρ definiert, mit $\mathbf{D} = 0$. Wir betrachten ferner zeitunabhängige Temperaturverteilungen $\theta = \theta(\mathbf{X})$. Wegen $s = \check{s}(\rho, \theta)$ ist für jedes Paar $(\theta = \theta(\mathbf{X}), \rho = \text{const.})$ die zeitunabhängige Entropieverteilung $s = s(\mathbf{X})$ eindeutig bestimmt. Das heißt, $\rho = \text{const.}$ und $\theta(\mathbf{X})$ definieren eindeutig einen zulässigen Prozeß. Aus

$$\rho \theta \dot{s} - \rho \dot{e} + \mathbf{T} : \mathbf{D} - \frac{\mathbf{q} \cdot \nabla \theta}{\theta} \geq 0 \quad (1.32)$$

folgt dann $-\hat{\mathbf{q}} \cdot \nabla \theta \geq 0$.

Bisher haben wir die Funktionen $\hat{\mathbf{C}}$ und $\hat{\mathbf{q}}$ allgemein gelassen. Tatsächlich sind alle Fluide isotrop, und alle Materialien erfüllen die Beobachterunabhängigkeit. Darum muß die Transformation $\hat{\mathbf{C}}$ isotrop sein, also

$$\hat{\mathbf{C}}(\rho, s) : \mathbf{D} = 2\mu \mathbf{D} + \lambda(\nabla \cdot \mathbf{v}) \mathbf{I},$$

und es gilt $\hat{\mathbf{q}}(\rho, s, \nabla \theta) = -\kappa \nabla \theta$. Hierbei haben wir folgenden Satz verwendet (siehe z.B. [8] für den Beweis).

Satz 1.2 (Darstellungssatz für isotrope lineare Tensorfunktionen). *Eine lineare Funktion $G : \text{Sym} \rightarrow \text{Sym}$ ist isotrop, d.h.*

$$\forall \mathbf{Q} \in \text{Orth}, \mathbf{A} \in \text{Sym} : \quad \mathbf{Q}G(\mathbf{A})\mathbf{Q}^T = G(\mathbf{Q}\mathbf{A}\mathbf{Q}^T)$$

genau dann, wenn Skalare μ und λ existieren mit

$$G(\mathbf{A}) = 2\mu\mathbf{A} + \lambda(\text{tr } \mathbf{A})\mathbf{I}.$$

Hierbei können λ , μ und κ von ρ und s abhängen. Die Dissipationsungleichung (1.31) und die Wärmeleitungsungleichung (1.32) führen auf die Ungleichungen $\mu \geq 0$ und $3\lambda + 2\mu \geq 0$, für deren Herleitung nichttriviale Argumente notwendig waren, sowie auf die offenkundige Ungleichung $\kappa \geq 0$. Zusammengefaßt haben wir folgende Beziehungen:

$$\mathbf{T} = -p\mathbf{I} + 2\mu\mathbf{D} + \lambda(\nabla \cdot \mathbf{v})\mathbf{I}, \quad \mu \geq 0, \quad 3\lambda + 2\mu \geq 0, \quad (1.33)$$

$$\mathbf{q} = -\kappa\nabla\theta, \quad \kappa \geq 0, \quad (1.34)$$

$$p = \rho^2 \frac{\partial \hat{e}}{\partial \rho}, \quad (1.35)$$

$$\theta = \frac{\partial \hat{e}}{\partial s}. \quad (1.36)$$

1.9. Flüssigkeiten und Festkörper

1.9.1. Flüssigkeiten. Wir nehmen nun $\rho = \text{const.}$ an sowie daß die Spannungen von

$$\text{sym}(\nabla \mathbf{v}) = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T)$$

abhängen. Ein *Newtonsches Fluid* ist dann durch eine *lineare* Abhängigkeit zwischen Spannung und Verzerrungsrate gegeben, also durch den Spannungstensor

$$\mathbf{T} = -p\mathbf{I} + \mu(\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T) + \lambda(\nabla \cdot \mathbf{v})\mathbf{I}, \quad (1.37)$$

wobei μ die Scherviskosität und λ die Druckviskosität ist. Setzt man (1.9.1) in die Impulsbilanz ein und nimmt $\rho = \text{const.}$ an, so erhält man die *Navier-Stokes-Gleichungen*

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad (1.38)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right) = -\nabla p + \mu \Delta \mathbf{v}. \quad (1.39)$$

Die Formulierung von Randbedingungen ist im allgemeinen kompliziert. Für die Strömung längs einer ebenen Wand mit Normalenvektor \mathbf{n} kann etwa $\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = 0$ vorgeschrieben werden. Auf Randstücken, durch welche Flüssigkeit in das Rechengebiet einströmt, kann \mathbf{v} vorgeschrieben werden, an Ausströmrändern hingegen der Druck p .

Wir betrachten nun Spezialfälle, die *exakt* behandelt werden können, und führen hierzu die dimensionslosen Größen \mathbf{v}^* , \mathbf{x}^* und t^* durch $\mathbf{v} = U\mathbf{v}^*$, $\mathbf{x} = L\mathbf{x}^*$ und $t = (L/U)t^*$ ein, wobei U eine typische Geschwindigkeit und L eine typische Länge ist.

Für nichtviskose Flüssigkeiten kann durch $p = \rho U^2 p^*$ ein dimensionsloser Druck eingeführt werden. Dann lauten (1.38) und (1.39)

$$\nabla^* \cdot \mathbf{v}^* = 0, \quad (1.40)$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}^*}{\partial t^*} + \mathbf{v}^* \cdot \nabla^* \mathbf{v}^* = -\nabla^* p^* + \frac{1}{\text{Re}} \Delta^* \mathbf{v}^*, \quad (1.41)$$

wobei $\text{Re} := \rho U L / \mu$ die *Reynolds-Zahl* ist. Betrachten wir $\text{Re} \rightarrow \infty$ und lassen wir die *-Notation weg, so erhalten wir als Bewegungsgleichungen für eine nichtviskose Flüssigkeit

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0,$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = -\nabla p.$$

Die Randbedingung an einem festen Rand ist $\mathbf{n} \cdot \mathbf{v} = \mathbf{n} \cdot \mathbf{v}_s$. Verwenden wir die Identität

$$\mathbf{v} \times (\nabla \times \mathbf{v}) = \frac{1}{2} \nabla v^2 - \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v},$$

dann folgt

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} - \mathbf{v} \times (\nabla \times \mathbf{v}) = -\nabla \left(p + \frac{1}{2} v^2 \right).$$

Mit dem *Wirbelvektor* $\boldsymbol{\zeta} := \nabla \times \mathbf{v}$ und den Identitäten $\nabla \times \nabla s = 0$ für ein glattes skalares Feld s sowie

$$\nabla \times (\mathbf{v} \times \boldsymbol{\zeta}) = \boldsymbol{\zeta} \cdot \nabla \mathbf{v} - \mathbf{v} \cdot \nabla \boldsymbol{\zeta}$$

folgt

$$\frac{\partial \boldsymbol{\zeta}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \boldsymbol{\zeta} = \boldsymbol{\zeta} \cdot \nabla \mathbf{v}. \quad (1.42)$$

Der Wirbelvektor $\boldsymbol{\zeta}$ kann aus seinem Anfangswert berechnet werden, wenn man (1.42) in folgender Form schreibt:

$$\frac{D\boldsymbol{\zeta}}{Dt} = \frac{\partial \boldsymbol{\zeta}(\mathbf{X}, t)}{\partial t} = \boldsymbol{\zeta} \frac{\partial}{\partial t} \nabla_{\mathbf{x}} \chi, \quad (1.43)$$

so daß

$$\boldsymbol{\zeta} = \boldsymbol{\zeta}(\mathbf{X}, 0) \exp(\nabla_{\mathbf{x}} \chi).$$

Jedes hinreichend glatte Vektorfeld hat eine Darstellung

$$\mathbf{v} = \nabla \phi + \nabla \times \mathbf{a} = \nabla \phi + \mathbf{v}'. \quad (1.44)$$

Hierbei kann man \mathbf{a} so wählen, daß $\nabla \mathbf{a} = 0$ gilt; (1.44) heißt dann *Helmholtz-Zerlegung*. Dann gilt $\boldsymbol{\zeta} = -\Delta \mathbf{a}$. Ist nun $G(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ eine Greensche Funktion für die Laplace-Gleichung der entsprechenden Geometrie, dann gilt

$$\mathbf{a}(\mathbf{x}) = - \int G(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \boldsymbol{\zeta}(\mathbf{y}) d\mathbf{y},$$

$$\mathbf{v}' = \nabla \times \mathbf{a} = - \int \nabla G(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \times \boldsymbol{\zeta}(\mathbf{y}) d\mathbf{y}.$$

Die Randbedingung für G ist $G = 0$ auf einer festen Oberfläche, somit gilt dort auch $\mathbf{n} \cdot \nabla G = 0$ und daher $\mathbf{n} \cdot \mathbf{v}' = 0$.

Ein anderer Fall liegt bei viskosen, langsamen Strömungen, sogenannten *Stokes-Strömungen* vor. Hier kann der Druck über $p = (\mu U/L)p^*$ dimensionslos gemacht werden. Die Bewegungsgleichungen nehmen dann folgende Form an:

$$\begin{aligned} \nabla^* \cdot \mathbf{v}^* &= 0, \\ \text{Re} \left(\frac{\partial \mathbf{v}^*}{\partial t^*} + \mathbf{v}^* \cdot \nabla^* \mathbf{v}^* \right) &= -\nabla^* p^* + \Delta^* \mathbf{v}^*. \end{aligned}$$

Für $\text{Re} \rightarrow 0$ erhält man die *Stokes-Gleichungen* (hier wieder in dimensionsbehafteter Form geschrieben)

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad (1.45)$$

$$-\nabla p + \mu \Delta \mathbf{v} = 0. \quad (1.46)$$

1.9.2. Festkörper. Festkörper haben klassischerweise einen bevorzugten Zustand. Ferner hängen die Spannungen von den Verzerrungen ab: $\mathbf{T} = \mathbf{T}(\nabla_{\mathbf{x}} \boldsymbol{\chi})$. Aus Invarianzgründen hängt \mathbf{T} nur vom symmetrischen Anteil von $\nabla_{\mathbf{x}} \boldsymbol{\chi}$ ab. Schreiben wir $\boldsymbol{\chi} = \mathbf{X} + \mathbf{U}$ und linearisieren für kleines \mathbf{U} , so folgt

$$\rho_0 \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} = \nabla \cdot \mathbf{T}(\boldsymbol{\gamma}), \quad \boldsymbol{\gamma} = \text{sym} \nabla \mathbf{u}.$$

wobei $\boldsymbol{\gamma}$ die lineare Verzerrung ist. Damit lautet die Spannungs-Deformations-Beziehung für lineare Elastizität:

$$\mathbf{T} = 2\mu_s \text{sym} \nabla \mathbf{u} + \lambda_s (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I},$$

wobei μ_s und λ_s die sogenannten *Lamé-Konstanten* sind. Die Impulsgleichung für lineare Elastizität lautet nun

$$\rho_0 \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} = \mu_s \Delta \mathbf{u} + (\lambda_s + \mu_s) \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}).$$

Als Randbedingung kann z.B. $\mathbf{t} = \mathbf{n} \cdot \mathbf{T}$ gewählt werden. Mit der Helmholtz-Darstellung von \mathbf{u} ,

$$\mathbf{u} = \nabla \Phi + \nabla \times \mathbf{A} \quad \text{mit} \quad \nabla \cdot \mathbf{A} = 0,$$

erhält man dann Lösungen mit

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} = c_s^2 \Delta \Phi, \quad \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} = c_p^2 \Delta \mathbf{A},$$

wobei

$$c_p = \left(\frac{\mu_s + 2\lambda_s}{\rho_0} \right)^{1/2}, \quad c_s = \left(\frac{\mu_s}{\rho_0} \right)^{1/2}$$

die primäre bzw. die sekundäre elastische Wellengeschwindigkeit bezeichnet.

Wir skalieren nun \mathbf{x} und t über $\mathbf{x} = L\mathbf{x}^*$ und $t = Tt^*$. Dann erhalten wir

$$\begin{aligned}\varepsilon_s^2 \frac{\partial^2 \Phi}{\partial (t^*)^2} &= \Delta^* \Phi, & \varepsilon_s &= \frac{L}{c_s T}, \\ \varepsilon_p^2 \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} &= c_p^2 \Delta \mathbf{A}, & \varepsilon_p &= \frac{L}{c_p T}.\end{aligned}$$

ist $T \gg L/c_s$, dann ist die Deformation im Festkörper hinreichend langsam, so daß $\nabla \cdot \mathbf{T} = 0$ gilt.

Wir diskutieren speziell *starre* Festkörper. Wir betrachten einen elastischen Festkörper im quasi-stationären Zustand und skalieren die Verschiebung durch $\mathbf{u} = \delta \mathbf{u}^*$. Dann gilt am Rand

$$\mathbf{t} = \frac{2\delta\mu_s}{L} \mathbf{n} \cdot \left(\text{sym } \nabla^* \mathbf{u}^* + \frac{\lambda_s}{\mu_s} (\nabla^* \cdot \mathbf{u}^*) \mathbf{I} \right).$$

Sind die Randspannungen klein gegenüber $\delta\mu_s/L$, dann sind auch die Verschiebungen klein und der Festkörper wird sich starr verhalten. Für einen Starrkörper ist die Verformung im Inneren gleich Null, d.h. dort ist $\text{sym } \nabla \mathbf{v} = 0$. Damit gilt innerhalb jeder Kugel $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$. Die Bewegungsgleichung im Festkörper ist $\nabla \cdot \mathbf{T} = 0$. Bei einer Starrkörperbewegung gibt es keine konstitutiven Gleichungen für die Spannung. Die Lösung für eine Starrkörperbewegung ist

$$\mathbf{x} = \mathbf{X} + \int \mathbf{V} dt + \int \mathbf{x} \times \boldsymbol{\omega} dt,$$

wobei \mathbf{V} die Geschwindigkeit eines Punktes innerhalb des Körpers und $\boldsymbol{\omega}$ die Rotationsgeschwindigkeit in bezug auf diesen ist.

Für linear-elastische Festkörper gilt $\boldsymbol{\chi} = \mathbf{X} + \mathbf{U}$ mit der Verschiebung \mathbf{U} . Die Impulsbilanz kann dann in der Form

$$\rho \frac{\partial^2 \mathbf{U}}{\partial t^2} = \nabla \cdot \mathbf{T}$$

geschrieben werden, wobei auf der rechten Seite implizit ein Übergang zu materiellen Koordinaten vollzogen worden ist. Für kleine Verformungen gilt nun $\mathbf{X} \approx \mathbf{x}$, $\mathbf{U}(\mathbf{X}, t) \approx \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$, so daß die Impulsbilanz approximativ geschrieben werden kann als

$$\rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} = \nabla \cdot \mathbf{T},$$

und der Unterschied zwischen materiellen und räumlichen Koordinaten auf die Spannungsdivergenz bleibt klein.

Die Lösungen dieser Gleichungen lassen elastische Wellen zu. Interessieren wir uns für Zeitskalen, die viel größer sind, als eine Welle braucht, um durch den Körper zu laufen, dann lassen wir den Trägheitsterm weg und erhalten $\nabla \cdot \mathbf{T} = 0$, also

$$(\lambda_s + \mu_s) \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}) + \mu_s \Delta \mathbf{u} = 0. \quad (1.47)$$

Dies kann geschrieben werden als $\mathbf{T} = \boldsymbol{\sigma} + \Theta \mathbf{I}$ mit $\Theta = (2\mu_s + 3\lambda_s)\nabla \cdot \mathbf{u}$, und die Spur von

$$\boldsymbol{\sigma} = \mu_{\text{sym}} \nabla \mathbf{u} - \frac{2}{3} \mu_s (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I}$$

verschwindet. Nehmen wir die Divergenz von (1.47), so folgt $\Delta \Theta = 0$. Ist Θ bekannt, so folgen die Verschiebungen aus (1.47).

Bilanzgleichungen für Mehrkomponentenströmungen

2.1. Mehrkomponentenmischungen

Wir betrachten Materialien wie Suspensionen oder Strömungen in porösen Medien, in denen identifizierbare Feststoffpartikel von einem (oder mehreren) kontinuierlichen Fluiden umgeben sind bzw. bei denen ein kontinuierliches Fluid durch eine poröse Matrix strömt. Wir argumentieren, daß die kleinste Abmessung der uns interessierenden Anfangs-Randwertprobleme größer ist als ein typisches Partikel oder eine Pore. Eine Kontinuumsbeschreibung ist dann angemessen, wenn jedes ‘Partikel’ des Kontinuums mit einer mathematischen Struktur versehen wird, die die großskaligen Phänomene aufgrund der Heterogenität der Mischung beschreibt.

Viele Mehrkomponentenmischungen haben beträchtliche Mikrostruktur; Partikel etwa können kugelförmig, länglich, flach, bikonkav usw. sein. Die Rotation dieser Partikel beeinflusst die Physik der interessierenden Anfangs-Randwertprobleme.

Die Präsenz mehr als nur einer Komponente in der Mischung geschieht hier durch den *Volumenanteil* $\alpha_k(\mathbf{x}, t)$ für jede Komponente. Ist $b(\mathbf{x}, t)$ die Kugel um \mathbf{x} mit Radius r und $V_k(b(r, \mathbf{x}))$ das Volumen von Komponente k in b , dann sei

$$A_k(r, \mathbf{x}) := \frac{V_k(b(r, \mathbf{x}))}{V(b(r, \mathbf{x}))}.$$

Die Schwierigkeiten, hieraus die Kontinuumsvariable $\alpha_k(\mathbf{x}, t)$ zu definieren, haben wir bereits diskutiert. Man sollte hier A_k durch Mittelbildung interpretieren; das geschieht aber erst später, und wir nehmen einfach an, daß die Grenzwerte sinnvoll sind. Sei also $V_k(b(r, \mathbf{x}; \mu))$ das Volumen von Komponente k innerhalb von b . Dann setzen wir

$$\alpha_k(r, \mathbf{x}) = \lim_{r \rightarrow 0} A_k(\mathbf{x}, t) = \lim_{r \rightarrow 0} \frac{\overline{V_k(b(r, \mathbf{x}))}}{V(b(r, \mathbf{x}))};$$

$\alpha_k(\mathbf{x}, t)$ ist dann die gemittelte Volumenfraktion von Komponente k innerhalb b .

Bereits hier (mit dieser Variablen) können zwei Körper mit großen und kleinen ‘Körnern’ nicht mehr unterschieden werden. Wir betrachten einen würfelförmigen Körper mit Seitenlänge L und kugelförmigen Körnern in einem gleichförmigen kubischen Gitter (Komponente 1) und eine die Zwischenräume füllende Flüssigkeit (Komponente 2). Unabhängig von der Korngröße gilt dann

$$\alpha_1 = \pi/6, \quad \alpha_2 = 1 - \pi/6.$$

2.2. Kinematik

Die Kinematik der Mehrkomponentenmischungen ist zu der der Einkomponentenmaterialien weitgehend analog. Wir betrachten eine Folge von Körpern \mathcal{B}_k , $k = 1, \dots, N$, deren Konfigurationen simultan dasselbe Raumgebiet einnehmen. Die Bewegungen der Konfigurationen von \mathcal{B}_k sind durch

$$\mathbf{x} = \boldsymbol{\chi}_k(\mathbf{X}_k, t) \quad (2.1)$$

gegeben. Wir nehmen an, $\boldsymbol{\chi}_k$ sei invertierbar:

$$\mathbf{X} = \boldsymbol{\chi}_k^{-1}(\mathbf{x}_k, t) \quad \text{mit} \quad \mathbf{X} = \boldsymbol{\chi}_k^{-1}(\boldsymbol{\chi}_k(\mathbf{X}, t), t).$$

Gilt $\boldsymbol{\chi}_k(\mathbf{X}_k, t) = \boldsymbol{\chi}_l(\mathbf{X}_k, t)$ für $k \neq l$, dann hat das Material k keine Relativbewegung zu Material l .

Wir führen nun

$$\dot{\mathbf{x}}_k := \frac{\partial \boldsymbol{\chi}_k(\mathbf{X}_k)}{\partial t} \quad (2.2)$$

ein. Die Größe $\mathbf{V}_k = \dot{\mathbf{x}}_k$ ist die Geschwindigkeit von \mathbf{X}_k zum Zeitpunkt t . Aus der Annahme, daß (2.1) invertierbar ist, folgt, daß

$$\mathbf{v}_k(\mathbf{x}, t) = \mathbf{V}_k(\boldsymbol{\chi}_k^{-1}(\mathbf{x}, t), t)$$

die Geschwindigkeit des materiellen Punktes als Funktion von \mathbf{x} und t ist. Diese räumliche ('Eulersche') Beschreibung ist für die weitere Behandlung die vorteilhafteste. Ist ϕ_k die räumliche Beschreibung einer Funktion $\phi_k = \phi_k(\mathbf{x}, t)$ und ist $\Phi_k = \Phi_k(\mathbf{X}_k, t)$ die entsprechende materielle Beschreibung, so gilt

$$\dot{\phi}_k(\mathbf{x}, t) = \frac{\partial \Phi_k(\mathbf{X}_k, t)}{\partial t} = \frac{\partial \phi_k(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t} \cdot \nabla \phi_k(\mathbf{x}, t) = \frac{\partial \phi_k(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \mathbf{v}_k(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla \phi_k(\mathbf{x}, t).$$

2.3. Bilanzgleichungen

Die Massendichten von Konfigurationen eines Körpers müssen sorgfältig eingeführt werden, da es zwei verschiedene offenkundige Definitionen gibt und beide nützlich sind.

Eine der Definitionen der Dichte liefert die Masse der Komponente k im Körper \mathcal{B}_k als

$$m_k(\mathcal{B}) = \int_{\boldsymbol{\chi}(\mathcal{B}_k)} \underline{\rho}_k \, dv,$$

wobei \mathcal{B}_k der Körper aus Komponente k ist, der zum Zeitpunkt t mit \mathcal{B} übereinstimmt. Dann ist $\underline{\rho}_k$ die Masse von $\boldsymbol{\chi}_k(\mathcal{B})$ pro Gesamteinheitsvolumen. Diese Definition ist analog der Diskussion der Masse eines einzelnen Körpers. Natürlich füllt die \mathcal{B}_k zugrundeliegende Struktur nicht den gesamten Raumbereich aus, sondern nur den Anteil α_k . Die durch $\alpha_k \rho_k = \underline{\rho}_k$ definierte Funktion ρ_k ist die Masse von Konstituent k bezogen auf das Einheitsvolumen von Komponente k . Die Größen ρ_k und $\underline{\rho}_k$ heißen *materielle* bzw. *scheinbare* Dichte von Komponente k .

2.3.1. Massenbilanz. Das Postulat der Massenbilanz lautet hier

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{X}(\mathcal{B})} \underline{\rho}_k dv = \int_{\mathcal{X}(\mathcal{B})} \Gamma_k dv,$$

wobei Γ_k die Massenproduktionsrate (durch Phasenübergänge oder Reaktion) pro Einheitsvolumen bezeichnet. Ändern wir die Integration zur Referenzkonfiguration und verwenden $\dot{J}_k = J_k \nabla \cdot \mathbf{v}_k$, so folgt

$$\int_{\mathcal{X}(\mathcal{B})} (\dot{\underline{\rho}}_k + \underline{\rho}_k \nabla \cdot \mathbf{v}_k - \Gamma_k) dv = 0.$$

Mit dem Lemma von Dubois-Reymond und unter der Annahme, daß der Integrand stetig ist, folgt die Massenerhaltungsgleichung

$$\dot{\underline{\rho}}_k + \underline{\rho}_k \nabla \cdot \mathbf{v}_k = \Gamma_k$$

beziehungsweise

$$\frac{\partial(\alpha_k \rho_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k \mathbf{v}_k) = \Gamma_k. \quad (2.3)$$

Eine äquivalente Formulierung folgt durch Integration von (2.3) über ein festes Raumvolumen:

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{X}(\mathcal{B})} \alpha_k \rho_k dv + \int_{\mathcal{X}(\mathcal{B})} \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k \mathbf{v}_k) dv = \int_{\mathcal{X}(\mathcal{B})} \Gamma_k dv$$

oder

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{X}(\mathcal{B})} \alpha_k \rho_k dv + \oint_{\partial \mathcal{X}(\mathcal{B})} \alpha_k \rho_k \mathbf{v}_k \cdot \mathbf{n} ds = \int_{\mathcal{X}(\mathcal{B})} \Gamma_k dv.$$

Der Massenstrom durch ein Flächenelement mit Einheitsnormalenvektor \mathbf{n} ist

$$\alpha_k \rho_k \mathbf{v}_k \cdot \mathbf{n}.$$

Dieser Massenstrom definiert die Massenzentrumsgeschwindigkeit (baryzentrische Geschwindigkeit).

2.3.2. Impulsbilanz. Der Gesamtimpuls der Komponente k ist

$$\int_{\mathcal{X}(\mathcal{B})} \underline{\rho}_k \mathbf{v}_k dv,$$

und wir postulieren hier die Impulsbilanz

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{X}(\mathcal{B})} \underline{\rho}_k \mathbf{v}_k dv = \mathcal{F}_k^b + \mathcal{F}_k^s,$$

wobei \mathcal{F}_k^b und \mathcal{F}_k^s die Volumen- bzw. Oberflächen-Impulsquelle von Komponente k bezeichnet. Für den Volumenquellterm verwenden wir die Darstellung

$$\mathcal{F}_k^b = \int_{\mathcal{X}(\mathcal{B})} (\underline{\rho}_k \mathbf{b}_k + \mathbf{M}_k + \Gamma_k \mathbf{v}_{ki}) dv,$$

wobei \mathbf{b}_k die Volumenkraft pro Einheitsmasse, \mathbf{M}_k die auf Komponente k wirkende Kraft durch Interaktion mit anderen Komponenten innerhalb von \mathcal{B} und $\Gamma_k \mathbf{v}_{ki}$ der durch die Massenquelle gegebene Impulsquellterm ist. Der Oberflächenquellterm besitzt die Darstellung

$$\mathcal{F}_k^s = \oint_{\partial\chi(\mathcal{B})} \underline{\mathbf{t}}_k ds,$$

wobei $\underline{\mathbf{t}}_k$ der Verzerrungsvektor ist, das heißt, die Impulsquelle pro Flächeneinheit von Komponente k . Hierbei ist $\underline{\mathbf{t}}_k$ die Impulsquelle pro Gesamtoberfläche, während \mathbf{t}_k , die Verzerrung von Komponente k , gegeben ist durch $\alpha_k \mathbf{t}_k = \underline{\mathbf{t}}_k$.

Wie im Einkomponentenfall gilt $\mathbf{t}_k = \mathbf{t}_k(\mathbf{x}, t; \mathbf{n})$. Hierbei ist \mathbf{t}_k die Kraft pro Flächeneinheit von Komponente k , die durch $\partial\chi(\mathcal{B})$ wirkt. Daher liegt es nahe, die Kraft pro Mischungs-Flächeneinheit als α_k mal der Kraft pro Komponenten-Flächeneinheit anzunehmen.

Wie im Einkomponentenfall folgt die Existenz eines Spannungstensors $\underline{\mathbf{T}}_k$ mit $\underline{\mathbf{t}}_k = \mathbf{n} \cdot \underline{\mathbf{T}}_k$ oder äquivalent die eines Tensors \mathbf{T}_k mit $\alpha_k \mathbf{t}_k = \alpha_k \mathbf{n} \cdot \mathbf{T}_k$. Die Impulsbilanz nimmt dann die Form

$$\frac{d}{dt} \int_{\chi(\mathcal{B})} \rho_k \mathbf{v}_k dv = \oint_{\partial\chi(\mathcal{B})} \underline{\mathbf{t}}_k ds + \int_{\chi(\mathcal{B})} (\rho_k \mathbf{b}_k + \mathbf{M}_k + \Gamma_k \mathbf{v}_{ki}) dv$$

an. Transformieren wir das Integral auf die Referenzkonfiguration $\chi_0(\mathcal{B}_0)$ und verwenden wir die Massenbilanz und den Divergenzsatz, dann folgt

$$\int_{\chi(\mathcal{B})} \left(\rho_k \dot{\mathbf{v}}_k + \Gamma_k (\mathbf{v}_k - \mathbf{v}_{ki}) - \nabla \cdot \underline{\mathbf{T}}_k - \rho_k \mathbf{b}_k - \mathbf{M}_k \right) dv = 0.$$

Mit der üblichen Argumentation und dem Dubois-Reymond-Lemma folgt dann

$$\rho_k \dot{\mathbf{v}}_k = \Gamma_k (\mathbf{v}_{ki} - \mathbf{v}_k) + \nabla \cdot \underline{\mathbf{T}}_k + \rho_k \mathbf{b}_k + \mathbf{M}_k;$$

diese Gleichung kann in den folgenden drei alternativen Formen geschrieben werden:

$$\begin{aligned} \alpha_k \rho_k \left(\frac{\partial \mathbf{v}_k}{\partial t} + \mathbf{v}_k \cdot \nabla \mathbf{v}_k \right) &= \Gamma_k (\mathbf{v}_{ki} - \mathbf{v}_k) + \nabla \cdot (\alpha_k \mathbf{T}_k) + \alpha_k \rho_k \mathbf{b}_k + \mathbf{M}_k, \\ \frac{\partial (\alpha_k \rho_k \mathbf{v}_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k \mathbf{v}_k \mathbf{v}_k) &= \Gamma_k \mathbf{v}_{ki} + \nabla \cdot (\alpha_k \mathbf{T}_k) + \alpha_k \rho_k \mathbf{b}_k + \mathbf{M}_k, \\ \frac{d}{dt} \int_{\chi(\mathcal{B})} \alpha_k \rho_k \mathbf{v}_k dv + \int_{\chi(\mathcal{B})} \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k \mathbf{v}_k \mathbf{v}_k) dv & \\ = \int_{\chi(\mathcal{B})} (\nabla \cdot (\alpha_k \mathbf{T}_k) + \Gamma_k \mathbf{v}_{ki} + \mathbf{M}_k + \alpha_k \rho_k \mathbf{b}_k) dv. & \end{aligned} \quad (2.4)$$

Mit dem Divergenzsatz folgt schließlich

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dt} \int_{\chi(\mathcal{B})} \alpha_k \rho_k \mathbf{v}_k \, dv + \oint_{\partial\chi(\mathcal{B})} \alpha_k \rho_k \mathbf{v}_k \mathbf{v}_k \cdot \mathbf{n} \, ds \\ &= \oint_{\partial\chi(\mathcal{B})} \alpha_k \mathbf{t}_k \, ds + \int_{\chi(\mathcal{B})} (\alpha_k \rho_k \mathbf{b}_k + \mathbf{M}_k + \Gamma_k \mathbf{v}_{ki}) \, dv. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Das zweite, dritte und vierte Integral in (2.5) bezeichnet die Impulsänderung innerhalb von $V = \chi(\mathcal{B})$ durch Massenfluß in V hinein oder heraus, durch den Kräfteinfluß des Materials außerhalb von V auf das darin befindliche, bzw. durch verschiedene Volumenkräfte.

2.3.3. Drehimpulsbilanz. Der Gesamtdrehimpuls von Komponente k innerhalb $V = \chi(\mathcal{B})$ ist

$$\int_{\chi(\mathcal{B})} \underline{\rho}_k \mathbf{x} \times \mathbf{v}_k \, dv;$$

die Drehimpuls- oder Drallbilanz für Komponente k ist dann

$$\frac{d}{dt} \int_{\chi(\mathcal{B})} \underline{\rho}_k \mathbf{x} \times \mathbf{v}_k \, dv = \mathcal{T}_k^b + \mathcal{T}_k^s,$$

wobei \mathcal{T}_k^b und \mathcal{T}_k^s die Volumen- bzw. Oberflächen-Drehimpulsquelle für Komponente k ist. Hier haben wir die Darstellung

$$\mathcal{T}_k^b = \int_{\chi(\mathcal{B})} \left(\underline{\rho}_k (\boldsymbol{\tau}_k + \mathbf{x} \times \mathbf{b}_k) + (\boldsymbol{\psi}_k + \mathbf{x} \times \mathbf{M}_k) + \Gamma_k (\boldsymbol{\alpha}_{ki} + \mathbf{x} \times \mathbf{v}_{ki}) \right) \, dv,$$

wobei $\boldsymbol{\tau}$ das Volumendrehmoment pro Einheitsmasse, $\boldsymbol{\psi}_k$ das auf die Komponente k wirkende Drehmoment aufgrund der Wechselwirkung mit anderen Komponenten in \mathcal{B} , und $\Gamma_k \boldsymbol{\alpha}_{ki}$ den Drehimpulszuwachs durch die Massenquelle bezeichnet. Der Oberflächen-Quellterm ist

$$\mathcal{T}_k^s = \oint_{\partial\chi(\mathcal{B})} (\underline{\mathbf{l}}_k + \mathbf{x} \times \mathbf{t}_k) \, ds,$$

wobei $\underline{\mathbf{l}}_k$ den Drehimpuls-Quellterm für Komponente k bezeichnet. Wie üblich definieren wir durch $\underline{\mathbf{l}}_k = \alpha_k \mathbf{l}_k$ den Drehimpuls-Quellterm \mathbf{l}_k für Komponente k pro Einheitsfläche von Komponente k . Durch die bekannte Schlußweise folgt die Existenz eines Tensors $\underline{\mathbf{L}}_k$ mit $\underline{\mathbf{l}}_k = \mathbf{n} \cdot \underline{\mathbf{L}}_k$ bzw. eines Tensors \mathbf{L}_k mit $\alpha_k \mathbf{l}_k = \alpha_k \mathbf{n} \cdot \mathbf{L}_k$. Die lokale Form der Drehimpulsbilanz ist dann

$$\nabla \cdot (\alpha_k \mathbf{L}_k) + \alpha_k (\mathbf{T}_k - \mathbf{T}_k^T) + \boldsymbol{\tau}_k + \Gamma_k \boldsymbol{\alpha}_{ki} = 0.$$

Wir gehen hier jedoch ausschließlich von nichtpolaren Mehrkomponentenmischungen aus, d.h. es soll gelten: $\mathbf{L}_k = 0$, $\boldsymbol{\tau}_k = 0$ und $\boldsymbol{\alpha}_{ki} = 0$. Damit sind die Spannungstensoren der Einzelkomponenten symmetrisch, d.h. $\mathbf{T}_k = \mathbf{T}_k^T$.

2.3.4. Energiebilanz. Die Energie einer Komponente k eines Körpers B innerhalb $V = \chi(\mathcal{B})$ ist

$$\int \rho_k \left(u_k + \frac{1}{2} v_k^2 \right) dv,$$

wobei u_k die innere Energie pro Einheitsmasse ist und $(1/2)v_k^2$ die kinetische Energie der mittleren Bewegung bezeichnet. Geschwindigkeitsfluktuationen aufgrund von Relativbewegungen werden in u_k berücksichtigt. Die Energiebilanz lautet dann

$$\frac{d}{dt} \int \rho_k \left(u_k + \frac{1}{2} v_k^2 \right) dv = \mathcal{W}_k^b + \mathcal{W}_k^s$$

mit dem Volumen- bzw. Oberflächenquellterm \mathcal{W}_k^b bzw. \mathcal{W}_k^s . Der Volumenquellterm \mathcal{W}_k^b hat hier die Darstellung

$$\mathcal{W}_k^b = \int_{\chi(\mathcal{B})} \left(\rho_k (r_k + \mathbf{v}_k \cdot \mathbf{b}_k) + E_k + \mathbf{v}_k \cdot \mathbf{M}_k + \Gamma_k u_{ki} \right) dv,$$

wobei r_k die durch ‘äußere’ Quellen verursachte Volumenkraft pro Einheitsmasse ist, E_k die Energiequelle für Komponente k ist, die auf Wechselwirkung mit anderen Komponenten innerhalb von \mathcal{B} zurückgeht, und $\Gamma_k u_{ki}$ die durch die Massenquelle bewirkte Energiequelle ist.

Der Oberflächenquellterm \mathcal{W}_k^s ist

$$\mathcal{W}_k^s = \oint_{\partial\chi(\mathcal{B})} (\mathbf{v}_k \cdot \underline{\mathbf{t}}_k - \underline{Q}_k) ds,$$

wobei \underline{Q}_k die Energiequelle von Komponente k pro Einheitsfläche ist (und Q_k die Energiequelle von Komponente k pro Einheitsfläche von Komponente k mit $\alpha_k Q_k = \underline{Q}_k$).

Wir erhalten hier wieder die Existenz eines Vektorfeldes $\underline{\mathbf{q}}_k$ mit $\underline{Q}_k = \mathbf{n} \cdot \underline{\mathbf{q}}_k$ bzw. eines Vektors \mathbf{q}_k mit $\alpha_k Q_k = \alpha_k \mathbf{n} \cdot \mathbf{q}_k$. Damit erhalten wir die Energiebilanz

$$\begin{aligned} \alpha_k \rho_k \dot{u}_k = & \alpha_k \mathbf{T}_k : \nabla \mathbf{v}_k - \nabla \cdot (\alpha_k \mathbf{q}_k) + \alpha_k \rho_k r_k + E_k \\ & + \Gamma_k \left(u_{ki} - u_k - \frac{1}{2} v_k^2 + \mathbf{v}_{ki} \cdot \mathbf{v}_k \right) \end{aligned} \quad (2.6)$$

oder alternativ

$$\begin{aligned} \alpha_k \rho_k \left(\frac{\partial u_k}{\partial t} + \mathbf{v}_k \cdot \nabla u_k \right) = & \alpha_k \mathbf{T}_k : \nabla \mathbf{v}_k - \nabla \cdot (\alpha_k \mathbf{q}_k) + \alpha_k \rho_k r_k + E_k \\ & + \Gamma_k \left(u_{ki} - u_k - \frac{1}{2} v_k^2 + \mathbf{v}_{ki} \cdot \mathbf{v}_k \right). \end{aligned} \quad (2.7)$$

Die innere Energie einer Komponente k kann sich sowohl durch Oberflächen- als auch durch Volumenkräfte ändern. In der Impulsbilanzgleichung (2.4) hat der Impulsaustausch dieselbe Form wie eine Volumenkraft, und in der Energiebilanz (2.6) tritt der Energieaustausch wie eine Körpererwärmung auf. Wir nehmen an, daß Volumenkraft und -erwärmung ‘extern’

vorgeschrieben werden, während der Impuls- und der Energieaustausch durch konstitutive Gleichungen gegeben sind.

2.4. Mehrkomponenten-Entropiegleichungen

Der Begriff der Irreversibilität in Mehrkomponentenmischungen beruht auf zwei verschiedenen Sichtweisen der Kontinuumsmechanik und ihren Interpretationen. Bei Einkomponenten-Materialien wird das Entropiekonzept verwendet, um die ‘Unordnung’ auf molekularer Ebene zu quantifizieren. Die ‘innere Energie’ entspricht dann der ‘Unordnung’, und die Temperatur ist ein Maß für diese ‘Unordnung’. Alles andere ist ‘freie Energie’, die in mechanische zurückverwandelt werden kann. Wir führen hier noch einen zweiten Entropiebegriff ein, nämlich denjenigen, der mit der Unordnung (oder Abweichung vom Gleichgewichtszustand) verbunden ist, die durch die Relativbewegung der Komponenten entsteht.

2.4.1. Mikro- und Mesoskalen-Energiegleichung. Wir setzen die Spannungstensoren der Komponenten als $\mathbf{T}_k = \mathbf{T}_k^m + \mathbf{T}_k^M$ an, wobei \mathbf{T}_k^m die Mikroskalen-Spannung ist, die der Kraft entspricht, die auf ein Oberflächenelement von Material k ausgeübt wird, und \mathbf{T}_k^M die Mesoskalen-Spannung bezeichnet, die dem Impulstransfer durch Fluktuationen in den Bewegungen der Komponenten um ihre mittlere Bewegung entspricht. Analog zerlegen wir den Wärmestromvektor für Komponente k durch $\mathbf{q}_k = \mathbf{q}_k^m + \mathbf{q}_k^M$, wobei \mathbf{q}_k^m dem Energiefluß durch Wärmeleitung des Materials aus Komponente k und der Mesoskalen-Wärmestromvektor \mathbf{q}_k^M der durch Fluktuationen transportierten Energie entspricht. Entsprechende Zerlegungen sind $u_k = u_k^m + u_k^M$ und $E_k = E_k^m + E_k^M$. Wir nehmen ferner an, daß die inneren Energien die folgenden separaten Bilanzgleichungen erfüllen:

$$\frac{\partial(\alpha_k \rho_k u_k^m)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k u_k^m \mathbf{v}_k) = \alpha_k \mathbf{T}_k^m : \nabla \mathbf{v}_k - \nabla \cdot (\alpha_k \mathbf{q}_k^m) + u_{ki}^m \Gamma_k + \alpha_k \rho_k r_k + E_k^m + \alpha_k \mathcal{D}_k, \quad (2.8)$$

$$\frac{\partial(\alpha_k \rho_k u_k^M)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k u_k^M \mathbf{v}_k) = \alpha_k \mathbf{T}_k^M : \nabla \mathbf{v}_k - \nabla \cdot (\alpha_k \mathbf{q}_k^M) + u_{ki}^M \Gamma_k + E_k^M - \alpha_k \mathcal{D}_k, \quad (2.9)$$

wobei \mathcal{D}_k die Energieverlustrate beim Übergang von der Meso- zur Mikroskala darstellt.

2.4.2. Mikro- und Mesoskalen-Entropiegleichungen. Die Mikro- bzw. Mesoskalen-Entropien der Komponente k innerhalb von $V = \chi(\mathcal{B})$ sind

$$\int_{\chi(\mathcal{B})} \alpha_k \rho_k s_k^m dv, \quad \int_{\chi(\mathcal{B})} \alpha_k \rho_k s_k^M dv.$$

Die Entropie von Komponente k in V ändert sich mindestens so schnell, wie Entropie hineinfließt und innen produziert wird. Die Flußraten der Entropie durch ∂V durch Massenbewegung sind

$$\oint_{\partial \chi(\mathcal{B})} \alpha_k \rho_k s_k^m \mathbf{v}_k \cdot \mathbf{n} ds, \quad \oint_{\partial \chi(\mathcal{B})} \alpha_k \rho_k s_k^M \mathbf{v}_k \cdot \mathbf{n} ds.$$

Die Mikro- und Mesoskalen- Entropien ändern sich durch den Energiefluß durch $\partial V = \partial \chi(\mathcal{B})$. Die zugehörigen Terme sind

$$\oint_{\partial \chi(\mathcal{B})} \alpha_k \Phi_k^m ds, \quad \oint_{\partial \chi(\mathcal{B})} \alpha_k \Phi_k^M ds,$$

wobei Φ_k^m und Φ_k^M den Mikro- bzw. Mesoskalentropiefluß pro Flächeneinheit der Komponente k bezeichnen. Die externen Mikro- und Mesoskalen-Entropiequellen von Komponente k sind

$$\int_{\chi(\mathcal{B})} \alpha_k \rho_k \sigma_k^m dv, \quad \int_{\chi(\mathcal{B})} \alpha_k \rho_k \sigma_k^M dv.$$

Die zweite Volumen-Entropiequelle ist verbunden mit dem Entropiezuwachs zu Komponente k zu Lasten der anderen Komponenten. Diese Terme sind gegeben durch

$$\int_{\chi(\mathcal{B})} S_k^m dv, \quad \int_{\chi(\mathcal{B})} S_k^M dv,$$

wobei S_k^m und S_k^M die Zuwachsraten der Mikro- bzw. Mesoskalenentropie von Komponente k zu Lasten der Entropien der anderen Komponenten bezeichnen. Schließlich bezeichnen

$$\int_{\chi(\mathcal{B})} \Gamma_k s_{ki}^m dv, \quad \int_{\chi(\mathcal{B})} \Gamma_k s_{ki}^M dv$$

den Mikro- bzw. Mesoskalen-Entropiequellterm, der auf Phasenübergänge zurückzuführen ist, wobei s_{ki}^m und s_{ki}^M die Mikro- und Mesoskalen-Interface-Entropiedichten sind. Mit diesen Bezeichnungen erhalten wir folgende Bilanzgleichungen:

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dt} \int_{\chi(\mathcal{B})} \alpha_k \rho_k s_k^m dv + \oint_{\partial \chi(\mathcal{B})} \alpha_k \rho_k s_k^m \mathbf{v}_k \cdot \mathbf{n} ds \\ & \geq \oint_{\partial \chi(\mathcal{B})} \alpha_k \Phi_k^m ds + \int_{\chi(\mathcal{B})} [\alpha_k \rho_k \sigma_k^m + S_k^m + \Gamma_k s_{ki}^m] dv, \end{aligned} \quad (2.10)$$

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dt} \int_{\chi(\mathcal{B})} \alpha_k \rho_k s_k^M dv + \oint_{\partial \chi(\mathcal{B})} \alpha_k \rho_k s_k^M \mathbf{v}_k \cdot \mathbf{n} ds \\ & \geq \oint_{\partial \chi(\mathcal{B})} \alpha_k \Phi_k^M ds + \int_{\chi(\mathcal{B})} [\alpha_k \rho_k \sigma_k^M + S_k^M + \Gamma_k s_{ki}^M] dv. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Ein Tetraederargument ähnlich dem in Abschnitt 1.3.2 benutzten führt auf $\Phi_k^m = \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\phi}_k^m$ und $\Phi_k^M = \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\phi}_k^M$. Damit erhalten wir die Entropieungleichungen

$$\frac{\partial(\alpha_k \rho_k s_k^m)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k \mathbf{v}_k s_k^m) \geq \nabla \cdot (\alpha_k \boldsymbol{\phi}_k^m) + \alpha_k \rho_k \sigma_k^m + S_k^m + \Gamma_k s_{ki}^m, \quad (2.12)$$

$$\frac{\partial(\alpha_k \rho_k s_k^M)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k \mathbf{v}_k s_k^M) \geq \nabla \cdot (\alpha_k \boldsymbol{\phi}_k^M) + \alpha_k \rho_k \sigma_k^M + S_k^M + \Gamma_k s_{ki}^M. \quad (2.13)$$

2.4.3. Temperaturen. Wir postulieren, daß die *Entropiequellen* in bezug auf die *Energiequellen* absolutstetig sind. Das heißt, wir nehmen an, daß die Mikroskalengrößen

$$\mathcal{S}_k^m(\mathcal{B}) := \int_{\mathcal{X}(\mathcal{B})} \alpha_k \rho_k \sigma_k^m dv, \quad \mathcal{S}_k^m(\partial\mathcal{B}) := - \oint_{\partial\mathcal{X}(\mathcal{B})} \alpha_k \phi_k^m \cdot \mathbf{n} ds, \quad \mathcal{S}_k^{mi}(\mathcal{B}) := \int_{\mathcal{X}(\mathcal{B})} S_k^m dv$$

und die Mesoskalengrößen

$$\mathcal{S}_k^M(\mathcal{B}) := \int_{\mathcal{X}(\mathcal{B})} \alpha_k \rho_k \sigma_k^M dv, \quad \mathcal{S}_k^M(\partial\mathcal{B}) := - \oint_{\partial\mathcal{X}(\mathcal{B})} \alpha_k \phi_k^M \cdot \mathbf{n} ds, \quad \mathcal{S}_k^{Mi}(\mathcal{B}) := \int_{\mathcal{X}(\mathcal{B})} S_k^M dv$$

in bezug auf die entsprechenden Energiequellen absolutstetig sind, nämlich

$$\mathcal{E}_k^m(\mathcal{B}) := \int_{\mathcal{X}(\mathcal{B})} \alpha_k \rho_k R_k^m dv, \quad \mathcal{E}_k^m(\partial\mathcal{B}) := - \oint_{\partial\mathcal{X}(\mathcal{B})} \alpha_k \mathbf{Q}_k^m \cdot \mathbf{n} ds, \quad \mathcal{E}_k^{mi}(\mathcal{B}) := \int \mathcal{E}_k^m dv$$

für die Mikroskala bzw.

$$\mathcal{E}_k^M(\mathcal{B}) := \int_{\mathcal{X}(\mathcal{B})} \alpha_k \rho_k R_k^M dv, \quad \mathcal{E}_k^M(\partial\mathcal{B}) := - \oint_{\partial\mathcal{X}(\mathcal{B})} \alpha_k \mathbf{Q}_k^M \cdot \mathbf{n} ds, \quad \mathcal{E}_k^{Mi}(\mathcal{B}) := \int \mathcal{E}_k^M dv$$

für die Mesoskala. Die Energiequellterme sind die Flußterme \mathbf{Q}_k^m und \mathbf{Q}_k^M , die Volumen-Energiequellterme R_k^m und R_k^M und die Interface-Quellterme \mathcal{E}_k^m und \mathcal{E}_k^M . Diese Terme müssen noch bestimmt werden.

Nach dem Satz von Radon-Nikodym gibt es nun Dichten ϑ_k^{mc} , ϑ_k^{mr} , ϑ_k^{Mc} , ϑ_k^{Mr} , ϑ_{ki}^m und ϑ_{ki}^M mit:

$$\mathcal{S}_k^m(\mathcal{B}) = \int_{\mathcal{X}(\mathcal{B})} \vartheta_k^{mr} \alpha_k \rho_k R_k^m dv, \quad (2.14)$$

$$\mathcal{S}_k^m(\partial\mathcal{B}) = - \oint_{\partial\mathcal{X}(\mathcal{B})} \vartheta_k^{mc} \alpha_k \mathbf{Q}_k^m \cdot \mathbf{n} ds, \quad (2.15)$$

$$\mathcal{S}_k^{mi}(\mathcal{B}) = \int_{\mathcal{X}(\mathcal{B})} \vartheta_{ki}^m \mathcal{E}_k^m dv, \quad (2.16)$$

$$\mathcal{S}_k^M(\mathcal{B}) = \int_{\mathcal{X}(\mathcal{B})} \vartheta_k^{Mr} \alpha_k \rho_k R_k^M dv, \quad (2.17)$$

$$\mathcal{S}_k^M(\partial\mathcal{B}) = - \oint_{\partial\mathcal{X}(\mathcal{B})} \vartheta_k^{Mc} \alpha_k \mathbf{Q}_k^M \cdot \mathbf{n} ds, \quad (2.18)$$

$$\mathcal{S}_k^{Mi}(\mathcal{B}) = \int_{\mathcal{X}(\mathcal{B})} \vartheta_{ki}^M \mathcal{E}_k^M dv. \quad (2.19)$$

In Analogie zur klassischen Theorie der Einkomponentenmaterialien können die Radon-Nikodym-Dichten wie folgt geschrieben werden:

$$\vartheta_k^{mc} = \frac{1}{\theta_k^{mc}} \vartheta_k^{mr} = \frac{1}{\theta_k^{mr}} \vartheta_k^{Mc} = \frac{1}{\theta_k^{Mc}}, \quad \vartheta_k^{Mr} = \frac{1}{\theta_k^{Mr}} \vartheta_k^{mi} = \frac{1}{\theta_{ki}^m} \vartheta_k^{Mi} = \frac{1}{\theta_{ki}^M}. \quad (2.20)$$

Die sechs hiermit eingeführten Größen sind analog zur Temperatur, die für homogene Materialien definiert ist. Wir nennen sie daher *Temperaturen*. Damit erhalten wir die Entropiegleichungen

$$\frac{\partial(\alpha_k \rho_k s_k^m)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k s_k^m \mathbf{v}_k) \geq -\nabla \cdot \left(\alpha_k \frac{\mathbf{Q}_k^m}{\theta_k^{mc}} \right) + \alpha_k \rho_k \frac{R_k^m}{\theta_k^{mr}} + \frac{\mathcal{E}_k^{mi}}{\theta_k^{mi}} + s_{ki}^m \Gamma_k, \quad (2.21)$$

$$\frac{\partial(\alpha_k \rho_k s_k^M)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k s_k^M \mathbf{v}_k) \geq -\nabla \cdot \left(\alpha_k \frac{\mathbf{Q}_k^M}{\theta_k^{Mc}} \right) + \alpha_k \rho_k \frac{R_k^M}{\theta_k^{Mr}} + \frac{\mathcal{E}_k^{Mi}}{\theta_k^{Mi}} + s_{ki}^M \Gamma_k. \quad (2.22)$$

Dieser Zugang führt sechs Temperaturen pro Komponente ein: die Mikroskalen-Wärmeleitungstemperatur θ_k^{mc} , die Mesoskalen-Wärmeleitungstemperatur θ_k^{Mc} , die Mikroskalen-Strahlungstemperatur θ_k^{mr} , die Mesoskalen-Strahlungstemperatur θ_k^{Mr} , sowie die Interface-Temperaturen θ_k^{mi} und θ_k^{Mi} . Mit dieser Anzahl von Temperaturen wird die Theorie stark unhandlich. Durch einige Plausibilitätsannahmen kann hier eine Vereinfachung erreicht werden. In Analogie zur klassischen Theorie für Einkomponentenmaterialien nehmen wir zunächst die Gleichheit der Mikroskalen-Wärmeleitungs- und Mikroskalen-Strahlungstemperaturen an, und definieren

$$\theta_k^m := \theta_k^{mc} = \theta_k^{mr}.$$

Ferner soll es für jede Komponente nur eine Mesoskalen-Temperatur geben:

$$\theta_k^M := \theta_k^{Mc} = \theta_k^{Mr} = \theta_k^{Mi}.$$

Schließlich nehmen wir ein thermodynamisches Gleichgewicht des Interfaces an, d.h. die Interface-Temperatur soll für alle Komponenten dieselbe sein:

$$\theta_i^m = \theta_{1i}^m = \theta_{2i}^m = \dots$$

Mit diesen Temperaturen und unter Verwendung der Massenbilanzen erhalten wir folgende Entropiegleichungen:

$$\alpha_k \rho_k \left(\frac{\partial s_k^m}{\partial t} + \mathbf{v}_k \cdot \nabla s_k^m \right) \geq -\nabla \cdot \left(\alpha_k \frac{\mathbf{Q}_k^m}{\theta_k^m} \right) + \alpha_k \rho_k \frac{R_k^m}{\theta_k^m} + \frac{\mathcal{E}_k^{mi}}{\theta_i^m} + (s_{ki}^m - s_k^m) \Gamma_k, \quad (2.23)$$

$$\alpha_k \rho_k \left(\frac{\partial s_k^M}{\partial t} + \mathbf{v}_k \cdot \nabla s_k^M \right) \geq -\nabla \cdot \left(\alpha_k \frac{\mathbf{Q}_k^M}{\theta_k^M} \right) + \alpha_k \rho_k \frac{R_k^M}{\theta_k^M} + \frac{\mathcal{E}_k^{Mi}}{\theta_i^M} + (s_{ki}^M - s_k^M) \Gamma_k. \quad (2.24)$$

2.4.4. Annahmen über die Energie- und Entropiequellen. Wir betrachten nun die Energiequellterme in (2.8) und (2.9). Hierbei nehmen wir folgende Zerlegungen an:

$$\mathbf{Q}_k^m = \mathbf{q}_k^m + \tilde{\mathbf{Q}}_k^m, \quad \mathbf{Q}_k^M = \mathbf{q}_k^M + \tilde{\mathbf{Q}}_k^M.$$

Der Energiequellterm für die Mikroskala ist $R_k^m = r_k$. Für die Mesoskala wird die Energiezufuhr durch die Interaktion zwischen Meso- und Mikroskala bewirkt. Damit gilt

$$R_k^M = -\frac{\alpha_k \mathcal{D}_k}{\rho_k}.$$

Für die Interface-Energietransferterme nehmen wir an:

$$E_k^m = \mathcal{E}_k^m + \tilde{E}_k^m, \quad E_k^M = -\mathbf{M}_k \cdot (\mathbf{v}_k - \mathbf{v}_i) + \tilde{E}_k^M.$$

Unter Verwendung der Mikro- und Mesoskalen-Energiebilanzen in den Entropiegleichungen folgt schließlich

$$\begin{aligned} \alpha_k \rho_k \left(\theta_k^m \frac{D_k s_k^m}{Dt} - \frac{D_k u_k^m}{Dt} \right) &\geq \frac{\alpha_k}{\theta_k^m} (\mathbf{q}_k^m + \tilde{\mathbf{Q}}_k^m) \cdot \nabla \theta_k^m - \nabla \cdot (\alpha_k \tilde{\mathbf{Q}}_k^m) - \alpha_k \mathbf{T}_k^m : \nabla \mathbf{v}_k \\ &+ \mathcal{E}_k^{\text{mi}} \left(\frac{\theta_k^m}{\theta_i^m} - 1 \right) - \tilde{E}_k^{\text{mi}} - \alpha_k \mathcal{D}_k + [\theta_k^m (s_{ki}^m - s_k^m) + u_k^m] \Gamma_k, \end{aligned} \quad (2.25)$$

$$\begin{aligned} \alpha_k \rho_k \left(\theta_k^M \frac{D_k s_k^M}{Dt} - \frac{D_k u_k^M}{Dt} \right) &\geq \frac{\alpha_k}{\theta_k^M} (\mathbf{q}_k^M + \tilde{\mathbf{Q}}_k^M) \cdot \nabla \theta_k^M - \nabla \cdot (\alpha_k \tilde{\mathbf{Q}}_k^M) \\ &+ \mathbf{M}_k \cdot (\mathbf{v}_k - \mathbf{v}_i) - \alpha_k \mathbf{T}_k^M : \nabla \mathbf{v}_k - \tilde{E}_k^M + [\theta_k^M (s_{ki}^M - s_k^M) + u_k^M] \Gamma_k. \end{aligned} \quad (2.26)$$

Wir erhalten somit zwei Energiebilanzen und zwei Entropiegleichungen pro Komponente, was zunächst sehr kompliziert scheint. Man kann jedoch hiermit Energie und Entropie in einen ‘thermischen’ (hier ‘Mikroskalen-’ genannten) und einen ‘turbulenten’ (hier: ‘Mesoskalen-’), durch Fluktuationen bedingten Anteil zerlegen.

2.5. Mischungsgleichungen

Zu jedem Zeitpunkt t und an jedem Punkt \mathbf{x} bildet die Gesamtheit von Konfigurationen von \mathcal{B}_k einen zusammengesetzten Körper \mathcal{B} . Es ist jedoch nützlich, den Körper von einem physikalisch motivierten Standpunkt aus zu betrachten, da er das am leichtesten beobachtbare und mit konventionellen Methoden meßbare Objekt darstellt. Auch vom mathematischen Standpunkt aus stellt diese Sichtweise eine Erleichterung dar, denn Randbedingungen können häufig viel leichter für \mathcal{B} als für die \mathcal{B}_k formuliert werden.

Die Definition der Eigenschaften von \mathcal{B} durch diejenigen von \mathcal{B}_k ist fast willkürlich. Die Nützlichkeit der hier eingeführten Begriffe wird sich später herausstellen.

Um die *Massendichte* von \mathcal{B} durch die \mathcal{B}_k zu definieren, betrachten wir eine Folge von Körpern, die alle dasselbe Raumgebiet, etwa V , einnehmen. Wir nehmen an, daß jeder Körper homogen sei, so daß seine Masse M_k gleichmäßig über V verteilt ist. Sei ρ_k die jeweilige Massendichte. Dann ist die Masse von \mathcal{B} gleich der Summe der Massen der konstituierenden Körper. Da jeder dieser Körper dasselbe Volumen hat, ist die *Massendichte von \mathcal{B}* gegeben durch

$$\rho = \sum_k \rho_k. \quad (2.27)$$

Dieses motivierende Argument ist nur für *homogene* Körper exakt. Wir fassen (2.27) als *allgemeine Definition* auf, d.h. jedes der Felder in dieser Gleichung wird als Funktion von Position und Zeit aufgefaßt.

Die Definition des *Volumenanteils* ist ähnlich. In einem Mehrkomponentenmaterial ist jede Komponente physikalisch verschieden von jeder anderen. Wir idealisieren dies, indem wir sagen, daß in einem gegebenen Raumgebiet jede Komponente einen Teil des Volumens, nämlich die *Volumenfraktion* α_k einnimmt. Dann ist das Gesamtvolumen des Körpers \mathcal{B}

gegeben durch

$$\alpha = \sum_k \alpha_k.$$

Wir nehmen an, daß diese Gleichung punktweise gilt, und verallgemeinern sie, wie die Massendichte, auf Felder. Die Restriktionen $\alpha_k \leq 1$ und $\alpha \leq 1$ sind offenkundig. Ein Punkt heißt *gesättigt* bzw. *ungesättigt*, falls an ihm $\alpha = 1$ bzw. $\alpha < 1$ gilt. Für die Definition anderer Größen folgen wir [14]. Die *Geschwindigkeit* \mathbf{v} in \mathcal{B} ist gegeben durch

$$\rho \mathbf{v} = \sum_k \alpha_k \rho_k \mathbf{v}_k. \quad (2.28)$$

Eine alternative Definition ist

$$\mathbf{v}_c = \sum_k \alpha_k \mathbf{v}_k. \quad (2.29)$$

Die Geschwindigkeit (2.28) ist die *Massenschwerpunkts-* oder *massengemittelte* Geschwindigkeit. Sie ist die Größe, die in den Massen- und Impulsbilanzen auftritt. Die Geschwindigkeit (2.29) ist die *Volumenmittelpunkts-* oder *volumengemittelte* Geschwindigkeit.

Im allgemeinen ist es schwierig, Aussagen über das Verhalten von \mathcal{B} ausgehend von solchen von \mathcal{B}_k zu machen. Jedoch ist es wichtig, ‘vernünftige’ Bilanzgleichungen für \mathcal{B} zu haben. Um diese zu erhalten, definieren wir die *Spannung* in \mathcal{B} durch

$$\mathbf{T} - \rho \mathbf{v} \mathbf{v} = \sum_k (\alpha_k \mathbf{T}_k - \alpha_k \rho_k \mathbf{v}_k \mathbf{v}_k). \quad (2.30)$$

Wir definieren die *Relativgeschwindigkeit* der Komponente k durch $\mathbf{v}'_k := \mathbf{v}_k - \mathbf{v}$. Dann folgt aus (2.28) gerade

$$\sum_k \alpha_k \rho_k \mathbf{v}'_k = 0,$$

und (2.30) kann in der Form

$$\mathbf{T} = \sum_k (\alpha_k \mathbf{T}_k - \alpha_k \rho_k \mathbf{v}'_k \mathbf{v}'_k)$$

geschrieben werden. Andere Definitionen sind

$$\rho \mathbf{b} = \sum_k \alpha_k \rho_k \mathbf{b}_k, \quad (2.31)$$

$$\mathbf{q} - \mathbf{T} \cdot \mathbf{v} - \rho \left(e + \frac{1}{2} v^2 \right) \mathbf{v} = \sum_k \left[\alpha_k \mathbf{q}_k - \alpha_k \mathbf{T}_k \cdot \mathbf{v}_k - \alpha_k \rho_k \left(e_k + \frac{1}{2} v_k^2 \right) \mathbf{v}_k \right]. \quad (2.32)$$

Andererseits gelten folgende Bilanzgleichungen für jeden der Körper \mathcal{B}_k :

$$\frac{\partial(\alpha_k \rho_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k \mathbf{v}_k) = \Gamma_k, \quad (2.33)$$

$$\frac{\partial(\alpha_k \rho_k \mathbf{v}_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k \mathbf{v}_k \mathbf{v}_k) = \Gamma_k \mathbf{v}_{ki} + \nabla \cdot (\alpha_k \mathbf{T}_k) + \alpha_k \rho_k \mathbf{b}_k + \mathbf{M}_k, \quad (2.34)$$

$$\alpha_k \rho_k \left(\frac{\partial u_k}{\partial t} + \mathbf{v}_k \cdot \nabla u_k \right) = \alpha_k \mathbf{T}_k : \nabla \mathbf{v}_k - \nabla \cdot (\alpha_k \mathbf{q}_k) + \alpha_k \rho_k r_k + E_k \quad (2.35)$$

$$+ \Gamma_k \left(u_{ki} - u_k - \frac{1}{2} v_k^2 + \mathbf{v}_{ki} \cdot \mathbf{v}_k \right).$$

Jede dieser Gleichungen erlaubt einen *Austausch* der entsprechenden Größe mit den anderen Körpern. Diese Austauschigkeit legt folgende Postulate nahe:

$$\sum_k \Gamma_k = 0 \quad (\text{Massenaustausch}),$$

$$\sum_k (\mathbf{M}_k + \Gamma_k \mathbf{v}_{ki}) = 0 \quad (\text{Impulsaustausch}),$$

$$\sum_k (E_k + W_k + \Gamma_k u_{ki}) = 0 \quad (\text{Energieaustausch}).$$

Hiermit, mit den Bilanzgleichungen (2.33)–(2.35) sowie mit den Definitionen (2.27), (2.28), (2.30), (2.31) und (2.32) folgt

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

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) = \nabla \cdot \mathbf{T} + \rho \mathbf{b},$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho \left[e + \frac{1}{2} v^2 \right] \right) + \nabla \cdot \left(\rho \left[e + \frac{1}{2} v^2 \right] \mathbf{v} \right) = \nabla \cdot (-\mathbf{q} + \mathbf{v} \cdot \mathbf{T}) + \rho (r + \mathbf{v} \cdot \mathbf{b}).$$

Dies sind (formal) die klassischen Bilanzgleichungen für Masse, Impuls und Energie wie für einen Einkomponenten-Körper.

Diese Ergebnisse sind konzeptuell einfach, benötigen aber teils erhebliche Berechnungen. Die Haupthypothese (nur für die Bilanzgleichungen) ist, daß die offenkundige Verallgemeinerung der klassischen Bilanzgleichungen auf die Komponenten einer Mischung auf offenkundige Weise auf die klassischen Bilanzgleichungen der Mischung führt. Die einzigen Zwischenschritte sind die Definitionen (2.27), (2.28), (2.30), (2.31) und (2.32). Das zuletzt eingeführte System von Bilanzgleichungen ist natürlich hochgradig unterbestimmt.

Nicht alle kinematischen Variablen für die Mischung folgen aus den entsprechenden Komponentenvariable auf “offenkundige Weise”. Beispielsweise folgt aus der Definition der Relativgeschwindigkeiten:

$$\rho \mathbf{D} = \sum_k \alpha_k \rho_k \mathbf{D}_k + \sum_k (\text{sym } \nabla (\alpha_k \rho_k) \mathbf{v}_k). \quad (2.36)$$

Eine vernünftige Definition der Starrheit ist $\mathbf{D} = 0$. Gleichung (2.36) zeigt somit, daß die Mischung nicht starr zu sein braucht, selbst wenn jede Komponente starr ist; dies gilt, falls $\nabla (\alpha_k \rho_k) \mathbf{v}_k \neq 0$. Dieses Ergebnis scheint der Intuition zu widersprechen: die Mischung zweier starrer Komponenten ist selbst nicht immer starr.

Mittelungstheorie

Wir greifen noch einmal die anfängliche Betrachtung eines Sedimentationsexperimentes auf. Der interessante Fall besteht hier nicht aus einem einzelnen Experiment, sondern etwa aus der *Menge* aller Experimente mit denselben Anfangs- und Randbedingungen. Diese Bedingungen sollen mit dem Mittelwert und der Verteilung von Partikeln und ihrer Geschwindigkeiten zusammenhängen. Diese Menge wird hier *Ensemble* genannt. Über diese Ensemble soll nun gemittelt werden. Unter anderem erlaubt die Ensemblemittelung die Interpretation von Phänomenen durch die Wiederholbarkeit von Mehrkomponentenströmungen: ein bestimmtes exaktes Experiment oder eine Realisierung ist nicht wiederholbar, aber jede Wiederholung des Experimentes führt zu einem neuen Element des Ensembles.

3.1. Zusammenfassung der lokalen Erhaltungsgleichungen

Für die Behandlung der Mittelungstheorie ist es nützlich, die Erhaltungsgleichungen noch einmal zusammenzufassen. Die Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie sowie die Entropiegleichung lauten

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0, \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) = \nabla \cdot \mathbf{T} + \rho \mathbf{b}, \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho \left(u + \frac{1}{2} v^2 \right) \right) + \nabla \cdot \left(\rho \mathbf{v} \left(u + \frac{1}{2} v^2 \right) \right) = \nabla \cdot (\mathbf{T} \cdot \mathbf{v} - \mathbf{q}) + \rho (r + \mathbf{b} \cdot \mathbf{v}), \quad (3.3)$$

$$\frac{\partial(\rho s)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho s \mathbf{v}) \geq \nabla \cdot \left(\frac{\mathbf{q}}{\theta} \right) + \frac{r}{\theta}, \quad (3.4)$$

wobei ρ die Dichte bezeichnet, \mathbf{v} die Geschwindigkeit, \mathbf{T} den Spannungstensor, \mathbf{b} die Volumenkraft, u die spezifische innere Energie, \mathbf{q} den Wärestrom, r die Wärmequelle pro Einheitsmasse, s die spezifische Entropie oder Entropie pro Einheitsmasse, \mathbf{q}/θ den Entropiestrom und r/θ die Entropiequelle. Für die hier betrachteten nichtpolaren Materialien gilt ferner

$$\mathbf{T} = \mathbf{T}^T.$$

Die Gleichungen (3.1)–(3.3) bzw. die Ungleichung (3.4) können wir zusammenfassend in der Form

$$\frac{\partial(\rho \Psi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \Psi \mathbf{v}) = \nabla \cdot \mathbf{J} + \rho f \quad (3.5)$$

Erhaltungsprinzip	Ψ	\mathbf{J}	f	m
Masse	1	0	0	0
Impuls	\mathbf{v}	\mathbf{T}	\mathbf{b}	\mathbf{m}_i^σ
Energie	$u + \frac{1}{2}v^2$	$\mathbf{T} \cdot \mathbf{v} - \mathbf{q}$	$\mathbf{b} \cdot \mathbf{v} + r$	ε_i^σ
Entropie	s	\mathbf{q}/θ	r/θ	q_i/θ_i

TABELLE 3.1. Variablen in den allgemeinen Erhaltungs- und Sprunggleichungen (3.5) und (3.10).

(bzw. als entsprechende Ungleichung) schreiben, wobei Ψ die erhaltene Größe, \mathbf{J} ihren molekularen (diffusiven) Fluß, und f ihre Quelldichte beschreiben, siehe Tabelle 3.1.

Die zu den Gleichungen (3.1)–(3.4) gehörenden Sprungbedingungen lauten

$$\left[\rho(\mathbf{v} - \mathbf{v}_i) \right] \cdot \mathbf{n} = 0, \quad (3.6)$$

$$\left[\rho\mathbf{v}(\mathbf{v} - \mathbf{v}_i) + \mathbf{T} \right] \cdot \mathbf{n} = \mathbf{m}_i^\sigma, \quad (3.7)$$

$$\left[\rho \left(u + \frac{1}{2}v^2(\mathbf{v} - \mathbf{v}_i) \right) + \mathbf{T} \cdot \mathbf{v} - \mathbf{q} \right] \cdot \mathbf{n} = \varepsilon_i^\sigma, \quad (3.8)$$

$$\left[\rho s(\mathbf{v} - \mathbf{v}_i) \right] \cdot \mathbf{n} = \frac{\varepsilon_i^\sigma}{\theta_i}, \quad (3.9)$$

wobei \mathbf{v}_i die Interface-Ausbreitungsgeschwindigkeit ist, \mathbf{n} der Einheitsnormalenvektor, \mathbf{m}_i^σ der Spannungsvektor der Oberflächenspannung, ε_i^σ die Oberflächenenergie des Interfaces und θ_i die Temperatur des Interfaces. Hierbei gilt [1]

$$\mathbf{m}_i^\sigma = H\sigma\mathbf{n} + \nabla_i\sigma,$$

wobei σ die Oberflächenspannung, H die mittlere Krümmung des Interfaces, und ∇_i den Gradienten in Oberflächenkoordinaten bezeichnen. Der Oberflächenenergie-Quellterm ist gegeben durch

$$\varepsilon_i^\sigma = H\sigma\mathbf{n} \cdot \mathbf{v}_i + \nabla \cdot (\sigma\mathbf{v}_i) - \frac{d_i u_i}{dt} - u_i \nabla_i \cdot \mathbf{v}_i,$$

wobei u_i die Oberflächen-Energiedichte und d/d_i die materielle Ableitung im Interface ist.

Die Sprungbedingungen (3.6)–(3.9) lassen sich auch zusammenfassen als

$$\left[\rho\Psi(\mathbf{v} - v\mathbf{v}_i) + \mathbf{J} \right] \cdot \mathbf{n} = m, \quad (3.10)$$

wobei m die Interface-Quelle von Ψ ist.

3.2. Mathematische Grundlagen der Ensemblemittelung

Ein *Ensemble* ist die Menge aller ‘möglichen’ Bewegungen in einem System. Um innerhalb der Theorie den Bewegungen Wahrscheinlichkeiten zuzuordnen zu können, müssen wir

das Ensemble mit einer gewissen Struktur versehen, d.h. wir müssen uns mit Mengen befassen, die *meßbar* sind. Wir formalisieren dies nun, wählen eine Menge X , und betrachten eine Teilmenge $A \subset X$. Dann heißt

$$\complement A := \{x \in X \mid x \notin A\}$$

das *Komplement* von A ; offenbar ist $X = A \cup \complement A$.

Definition 3.1. Eine Algebra \mathcal{A} ist ein System von Teilmengen A, B, \dots mit folgenden Eigenschaften:

1. $A \in \mathcal{A}, B \in \mathcal{A} \implies A \cup B \in \mathcal{A}$,
2. $A \in \mathcal{A} \implies \complement A \in \mathcal{A}$,
3. $A \in \mathcal{A}, B \in \mathcal{A} \implies A \cap B \in \mathcal{A}$.

Damit gehören auch alle *endlichen* Vereinigungen, im allgemeinen aber nicht alle *abzählbaren* Vereinigungen zu \mathcal{A} . Zu einer gegebenen Menge X kann man jedoch eine Algebra \mathcal{A} von Teilmengen finden, so daß gilt:

$$A_i \in \mathcal{A} \forall i \in \mathbb{N} \implies \bigcup_{i=1}^{\infty} A_i \in \mathcal{A}. \quad (3.11)$$

Definition 3.2. Eine Algebra \mathcal{A} mit der Eigenschaft (3.11) heißt σ -Algebra.

Dieser Formalismus ist nicht etwa ‘leer’. So zum Beispiel gibt es für jedes System von Teilmengen von X , die sogenannten offenen Mengen, eine kleinste σ -Algebra, die dieses System enthält.

Definition 3.3. Die Borel-Mengen sind die Elemente der kleinsten σ -Algebra, die die offenen Mengen enthält.

In unseren Anwendungen sind die Elemente, die wir als Realisierungen betrachten, stark ‘benutzerabhängig’. Beispielsweise könnte eine Realisierung aus Werten der Spannung (Druck oder elastische Spannung), der Geschwindigkeit, der Dichte, der Temperatur und der Positionen der Interfaces bestehen. Sei nun f eines dieser Felder. Wir bezeichnen die Realisierung mit μ und kennzeichnen die Abhängigkeit von f von der Realisierung durch die Schreibweise $f(\mathbf{x}, t; \mu)$. Das *Ensemble* \mathcal{E} ist dann die Menge aller Realisierungen μ . Jede Teilmenge eines Ensembles heißt dann *Unterensemble* (und ist natürlich wieder ein Ensemble).

Die Menge aller möglichen Realisierungen ein und desselben makroskopischen Prozesses ist natürlich groß und erfordert die vertiefte Behandlung ‘großer Mengen’. Die Borel-Mengen sind grob gesprochen diejenigen Mengen, denen man eine Wahrscheinlichkeit zuordnen kann. Für eine Mehrkomponentenströmung kann gezeigt werden, daß die interessierenden Borel-Mengen durch elementare Mengen von Realisierungen der Form

$$\bar{\mathcal{E}}(\mathbf{x}, t; F) := \{\mu \mid f(\mathbf{x}, t; \mu) \leq F\}, \quad F \in \mathbb{R} \quad (3.12)$$

beschrieben werden können; eine Borel-Menge kann dann durch abzählbare Schnitte, Vereinigungen und Komplemente solcher Mengen von Realisierungen erzeugt werden.

Bezeichnet $f(\mathbf{x}, t; \mu)$ irgendein Feld und sind F und dF Zahlen, dann ist die Borel-Menge derjenigen Prozesse, für die f Werte zwischen F und $F + dF$ annimmt, gegeben durch

$$d\bar{\mathcal{E}}(x, t; F, F + dF) := \bar{\mathcal{E}}(\mathbf{x}, t; F + dF) \cap \mathcal{C}\bar{\mathcal{E}}(\mathbf{x}, t; F).$$

Für den Ensemble-Mittelungsprozeß ist die Wahl eines *Maßes* wichtig. Für die Borel-Menge der Realisierungen ist das interessierende Maß die *Wahrscheinlichkeit* $m(\cdot)$. Sie muß folgendes erfüllen:

1. $m(\emptyset) = 0$,
2. $m(\mathcal{E}) = 1$,
3. sind $\bar{\mathcal{E}}_1 \subset \mathcal{E}$ und $\bar{\mathcal{E}}_2 \subset \mathcal{E}$ Borel-Mengen mit $\bar{\mathcal{E}}_1 \subset \bar{\mathcal{E}}_2$, dann $m(\bar{\mathcal{E}}_1) \leq m(\bar{\mathcal{E}}_2)$,
4. gilt $\bar{\mathcal{E}}_i \subset \mathcal{E}$ für $i \in \mathbb{N}$ mit $\bar{\mathcal{E}}_i \cap \bar{\mathcal{E}}_j = \emptyset$ für $i \neq j$, so folgt

$$m\left(\bigcup_{i=1}^{\infty} \bar{\mathcal{E}}_i\right) = \sum_{i=1}^{\infty} m(\bar{\mathcal{E}}_i).$$

Die mit den Realisierungen verbundenen Wahrscheinlichkeiten, oder genauer, die mit den Borel-Mengen von Realisierungen verbundenen Wahrscheinlichkeiten, sind natürlich i.a. für jeden einzelnen Prozeß unterschiedlich, selbst wenn dieselben Realisierungen in verschiedenen Mengen möglicher ‘Ergebnisse’ liegen können.

In der Definition des Maßes auf dem Ensemble (oder genauer, auf den Borel-Teilmengen) ist implizit enthalten, welche die wichtigen Eigenschaften der Bewegung sind. Das Maß $m(\bar{\mathcal{E}})$ einer Borel-Teilmenge $\bar{\mathcal{E}}$ ist die Wahrscheinlichkeit der Prozesse in dieser Teilmenge, die in der Bewegung auftreten.

Ist die Borel-Menge von der elementaren Art wie in (3.12), dann ist dieses Maß gleich der Wahrscheinlichkeit dafür, daß $f \leq F$ ist. Die Wahrscheinlichkeit für das Eintreten eines bestimmten Prozesses μ^* ist bedeutungslos, aber wir können die Wahrscheinlichkeit dafür diskutieren, daß f innerhalb eines ‘Abstandes’ oder einer ‘Toleranz’ dF um eine gegebene Funktion $f^*(\mathbf{x}, t)$ liegt, indem wir folgende Borel-Menge betrachten:

$$d\bar{\mathcal{E}}(f^*, dF) := \left\{ \mu \left| \max_{(\mathbf{x}, t)} |f(\mathbf{x}, t; \mu) - f^*(\mathbf{x}, t)| \leq dF \right. \right\}. \quad (3.13)$$

Hierbei braucht f^* nicht notwendigerweise ein Feld zu sein, das zu irgendeinem Prozeß gehört. Nimmt man dies aber dennoch an, d.h. $f^*(\mathbf{x}, t) = f(\mathbf{x}, t; \mu^*)$, dann kann dF als ‘Toleranz’ aufgefaßt werden. Die Wahrscheinlichkeit dafür, ‘innerhalb von dF um f^* zu liegen’, ist gleich dem Maß der Borel-Menge (3.13), also gleich

$$m(d\bar{\mathcal{E}}(f^*, dF)).$$

Die Wahrscheinlichkeit dafür, in der ‘Nähe’ eines bestimmten Prozesses zu liegen, hängt von den spezifizierten Bedingungen ab und davon, wie gut sie in einem gegebenen (Versuchs-)Apparat erreicht werden können. Betrachten wir zwei unterschiedliche Strömungen in demselben Apparat, dann können diese viele unterschiedliche mikroskopische Prozesse gemeinsam haben, nur eben mit unterschiedlichen Wahrscheinlichkeiten. Damit gehört zum Begriff ‘Prozeß’ auch Information über das Ensemble mikroskopischer Prozesse und die

Wahrscheinlichkeiten ihres Auftretens. Wir beziehen uns auf den makroskopischen Prozeß durch $\mathcal{M} = (\mathcal{E}, m)$ (bzw. einfach nur ‘Prozeß’).

Ist f ein Feld, dann ist das *Mittel* von f wie folgt durch die Borel-Mengen definiert. Wir führen eine Partition $-\infty < F_1 < F_2 < \dots < F_N < \infty$ ein und setzen $dF_1 := F_2 - F_1$, $dF_2 := F_3 - F_2$, und so weiter. Dann ist das Mittel von f gegeben durch

$$\bar{f}(\mathbf{x}, t) := \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^{N-1} F_i m(d\bar{\mathcal{E}}(\mathbf{x}, t; F_i, dF_i)),$$

wobei im Limes $\max dF_i \rightarrow 0$ gelten soll. Dieses Vorgehen führt zum Lebesgue-Integral über Borel-Mengen.

Für Mehrkomponentenmaterialien ist auch typisch, daß es keine ausgezeichneten Realisierungen gibt, die mit positiver Wahrscheinlichkeit auftreten. Daher nehmen wir an, daß das Maß einer Borel-Menge $\bar{\mathcal{E}}(\mathbf{x}, t; F, F + dF)$ für alle F bezüglich dF absolutstetig ist. Das Maß dieser Menge,

$$m(\bar{\mathcal{E}}(\mathbf{x}, t; F, F + dF)),$$

ist dann durch eine Dichte $dm(\mu)$ gegeben, und wir definieren das Mittel von f wie folgt:

Definition 3.4. *Das Ensemble-Mittel von f ist*

$$\bar{f}(\mathbf{x}, t) := \int_{\mathcal{E}} f(\mathbf{x}, t; \mu) dm(\mu), \quad (3.14)$$

wobei $dm(\cdot)$ die Dichte für das Maß, d.h. die Wahrscheinlichkeitsdichte, auf der Menge aller Prozesse \mathcal{E} ist.

Die Bezeichnung (3.14) ist natürlich suggestiv, und wir möchten die Eigenschaften der Linearität des Integraloperators ausnutzen, insbesondere bezüglich der Vertauschung von Integration und Differentiation.

3.3. Resultate der Ensemble-Mittelung

3.3.1. Reynolds-Regeln. Der durch (3.14) definierte Mittelungsoperator besitzt einige Eigenschaften, die als Linearität zusammengefaßt werden können. Sind $c_1, c_2 \in \mathbb{R}$ und f_1, f_2 Felder von Realisierungen aus dem Ensemble \mathcal{E} , dann gilt

$$\int_{\mathcal{E}} (c_1 f_1(\mathbf{x}, t; \mu) + c_2 f_2(\mathbf{x}, t; \mu)) dm(\mu) = c_1 \int_{\mathcal{E}} f_1(\mathbf{x}, t; \mu) dm(\mu) + c_2 \int_{\mathcal{E}} f_2(\mathbf{x}, t; \mu) dm(\mu),$$

das heißt,

$$\overline{c_1 f_1 + c_2 f_2} = c_1 \bar{f}_1 + c_2 \bar{f}_2.$$

Ferner kann das Ensemble auch zerlegt werden. Ist $\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \cup \mathcal{E}_2$ mit $\mathcal{E}_1 \cap \mathcal{E}_2 = \emptyset$, so gilt

$$\int_{\mathcal{E}} f(\mathbf{x}, t; \mu) dm(\mu) = \int_{\mathcal{E}_1} f(\mathbf{x}, t; \mu) dm(\mu) + \int_{\mathcal{E}_2} f(\mathbf{x}, t; \mu) dm(\mu).$$

Sei nun \bar{f} ein Mittel, $c_1, c_2 \in \mathbb{R}$, und seien f_1 und f_2 Felder aus Realisierungen in Ensembles \mathcal{E}_1 bzw. \mathcal{E}_2 . Dann ist $c_1 f_1 + c_2 f_2$ ein Feld im Produktensemble $\mathcal{E}_1 \times \mathcal{E}_2$, und es gilt

$$\overline{c_1 f_1 + c_2 f_2} = c_1 \bar{f}_1 + c_2 \bar{f}_2.$$

Zum Beweis rechnen wir aus:

$$\begin{aligned} \overline{c_1 f_1 + c_2 f_2} &= \int_{\mathcal{E}_1 \times \mathcal{E}_2} (c_1 f_1 + c_2 f_2) dm(\mu_1 \times \mu_2) \\ &= c_1 \int_{\mathcal{E}_1 \times \mathcal{E}_2} f_1 dm(\mu_1 \times \mu_2) + c_2 \int_{\mathcal{E}_1 \times \mathcal{E}_2} f_2 dm(\mu_1 \times \mu_2) \\ &= c_1 \int_{\mathcal{E}_1} f_1 dm(\mu_1) \int_{\mathcal{E}_2} dm(\mu_2) + c_2 \int_{\mathcal{E}_2} f_2 dm(\mu_2) \int_{\mathcal{E}_1} dm(\mu_1) \\ &= c_1 \int_{\mathcal{E}_1} f_1 dm(\mu_1) + c_2 \int_{\mathcal{E}_2} f_2 dm(\mu_2) = c_1 \bar{f}_1 + c_2 \bar{f}_2. \end{aligned}$$

Sind f_1 und f_2 Felder in einer Realisierung in \mathcal{E} , dann ist auch $\bar{f}_1 f_2$ ein Feld in dieser Realisierung mit dem Mittel

$$\overline{\bar{f}_1 f_2} = \int_{\mathcal{E}} \bar{f}_1 f_2 dm(\mu) = \bar{f}_1 \int_{\mathcal{E}} f_2 dm(\mu) = \bar{f}_1 \cdot \bar{f}_2.$$

Ist insbesondere $f_2 \equiv 1$, so folgt

$$\overline{\bar{f}_1} = \bar{f}_1.$$

3.3.2. Verallgemeinerte Funktionen. Mehrkomponentenmischungen führen auf Unstetigkeiten in den Feldern, etwa dadurch, daß Materialeigenschaften wie Viskosität oder Elastizität in verschiedenen Komponenten unterschiedlich sind. Damit sind $\partial f / \partial t$ und ∇f verallgemeinerte Funktionen. Wir nehmen an, daß die interessierenden Felder innerhalb jedes Materiales glatt sind und sich nur über mäßig komplizierte Flächen, die die Komponenten voneinander trennen, hinweg ändern. Die adäquate Behandlung erfordert die Verwendung von Testfunktionen. Sei Φ die Menge der (räumlichen und zeitlichen) Testfunktionen, d.h. $\phi = \phi(\mathbf{x}, t) \in \Phi$, falls ϕ kompakten Träger hat und hinreichend oft differenzierbar ist. Ist dann $f(\mathbf{x}, t)$ eine verallgemeinerte Funktion, so sind die Ableitungen von f definiert durch

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \phi(\mathbf{x}, t) \frac{\partial f(\mathbf{x}, t)}{\partial t} dv dt &= - \int_{\Omega} \frac{\partial \phi}{\partial t}(\mathbf{x}, t) f(\mathbf{x}, t) dv dt, \\ \int_{\Omega} \phi(\mathbf{x}, t) \nabla f(\mathbf{x}, t) dv dt &= - \int_{\Omega} \nabla \phi(\mathbf{x}, t) f(\mathbf{x}, t) dv dt \end{aligned}$$

für alle $\phi \in \Phi$, wobei Ω eine räumlich und zeitlich kompakte Menge mit $\text{supp } \phi \subset \Omega$ ist.

3.3.3. Die charakteristische Funktion X_k . Häufig möchte man jede Komponente theoretisch isolieren, selbst in der Mikroskalen-Beschreibung. Hierzu verwenden wir die *Komponenten-Indikatorfunktion* oder *charakteristische Funktion* $X_k(\mathbf{x}, t; \mu)$ in jeder Realisierung μ . Diese Funktion ist wie folgt definiert:

$$X_k(\mathbf{x}, t; \mu) := \begin{cases} 1 & \text{falls } \mathbf{x} \text{ in der Realisierung } \mu \text{ zur Komponente } k \text{ gehört,} \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

Die Funktion X_k “greift” also “Komponente k heraus” und ignoriert alle anderen Komponenten. bzw. Interfaces.

Wir betrachten ferner die *Interface-Deltafunktion*, nämlich die in vielen Situationen wichtige Größe ∇X_k . Sei nun ϕ eine Testfunktion, dann betrachten wir

$$\int_{\Omega} \phi(\mathbf{x}, t) \nabla X_k(\mathbf{x}, t) \, d\mathbf{v} dt = - \int_{\Omega} \nabla \phi(\mathbf{x}, t) X_k(\mathbf{x}, t) \, d\mathbf{v} dt = \int_{\Omega_k} \nabla \phi(\mathbf{x}, t) \, d\mathbf{v} dt,$$

wobei Ω_k der Schnitt von Ω mit Komponente k ist. Die Anwendung des Divergenzsatzes liefert

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \phi(\mathbf{x}, t) \nabla X_k(\mathbf{x}, t) \, d\mathbf{v} dt &= - \int_{\partial\Omega_k} \mathbf{n}_k \phi(\mathbf{x}, t) \, d\mathbf{v} dt \\ &= - \int_{\Omega_k} \mathbf{n}_k \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i, t) \phi(\mathbf{x}, t) \, d\mathbf{v} dt, \end{aligned}$$

wobei $\partial\Omega_k$ das Interface zwischen den Komponenten bezeichnet, \mathbf{n}_k den zugehörigen Normalenvektor, der in das Äußere von Komponente k zeigt, und $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i, t)$ die Dirac-Deltafunktion für das Interface ist. Damit gilt

$$\nabla X_k = \mathbf{n}_k \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i, t).$$

Der Begriff der Richtungsableitung kann auch auf diesen Fall verallgemeinert werden, mit dem Ergebnis, daß die δ -Funktion für das Interface wie folgt geschrieben werden kann:

$$\frac{\partial X_k}{\partial \mathbf{n}} = \mathbf{n}_k \cdot \nabla X_k.$$

Schließlich betrachten wir noch den Begriff der *topologischen Gleichung*. Im Mittelungsprozeß benötigen wir eine Gleichung für den Term

$$\frac{\partial X_k}{\partial t} + \mathbf{v}_i \cdot \nabla X_k.$$

Eine solche Gleichung leiten wir nun unter Verwendung verallgemeinerter Funktionen her. Sei ϕ nun eine Testfunktion, dann gilt

$$\int_{\Omega} \phi \frac{\partial X_k}{\partial t} \, d\mathbf{v} dt = - \int_{\Omega} \frac{\partial \phi}{\partial t} X_k \, d\mathbf{v} dt, \quad \int_{\Omega} \phi \nabla X_k \, d\mathbf{v} dt = - \int_{\Omega} \nabla \phi X_k \, d\mathbf{v} dt$$

und somit

$$\int_{\Omega} \phi \left(\frac{\partial X_k}{\partial t} + \mathbf{v}_i \cdot \nabla X_k \right) \, d\mathbf{v} dt = - \int_{\Omega} \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi \mathbf{v}_i) \right) X_k \, d\mathbf{v} dt.$$

Die Anwendung des Reynoldsschen Transporttheorems [1] liefert

$$\int_{\Omega} \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi \mathbf{v}_i) \right) X_k \, dv dt = \int_{t=-\infty}^{\infty} \frac{d}{dt} \int_{V_k(t)} \phi \, dv dt = \left[\int_{V_k(t)} \phi \, dv \right]_{t=-\infty}^{\infty} = 0,$$

da ϕ für hinreichend großes t verschwindet. Somit gilt die topologische Gleichung

$$\frac{\partial X_k}{\partial t} + \mathbf{v}_i \cdot \nabla X_k = 0. \quad (3.15)$$

Die physikalische Interpretation von (3.15) ist wie folgt. Wir beachten zunächst, daß die linke Seite von (3.15) die dem Interface folgende materielle Ableitung von X_k ist. Betrachten wir dann einen Punkt, der *nicht* auf dem Interface liegt, so gilt entweder $X_k = 0$ oder $X_k = 1$. In beiden Fällen verschwinden beide partielle Ableitungen, und die linke Seite von (3.15) verschwindet identisch. Wir betrachten sodann einen Punkt auf dem Interface. Dieser bewegt sich mit der Interface-Geschwindigkeit. Dann stellt die Funktion X_k einen Sprung dar, der konstant bleibt. Somit verschwindet ihre materielle Ableitung, die dem Interface folgt.

3.3.4. Gauß- und Leibniz-Regeln. Wir benötigen Ausdrücke für $\overline{\partial f / \partial t}$ und $\overline{\nabla f}$. Ist f glatt genug, so daß Integration und Differentiation vertauscht werden können, dann folgt aus der Definition des Ensemble-Mittels bereits

$$\overline{\frac{\partial f}{\partial t}} = \frac{\partial \bar{f}}{\partial t}, \quad \overline{\nabla f} = \nabla \bar{f}.$$

Ist f unstetig, dann können $\partial f / \partial t$ und ∇f den Charakter einer δ -Funktion besitzen. Dann muß man $\overline{\partial f / \partial t}$ und $\overline{\nabla f}$ vorsichtig interpretieren. Wir betrachten nun speziell den Ausdruck $\nabla(X_k f)$, wobei X_k die oben eingeführte Indikatorfunktion ist. Hiermit gilt

$$\int_{\Omega} \phi \nabla(X_k f) \, dv dt = - \int_{\Omega} X_k f \nabla \phi \, dv dt = - \int_{\Omega_k} f \nabla \phi \, dv dt.$$

Wir nehmen nun an, die Funktion f verhalte sich auf Ω_k regulär, sodaß der Divergenzatz angewendet werden kann. Wir erhalten dann

$$\begin{aligned} - \int_{\Omega_k} f \nabla \phi \, dv dt &= - \oint_{\partial \Omega_k} \mathbf{n} \phi f_{ki} \, ds dt + \int_{\Omega_k} \phi \nabla f \, dv dt \\ &= - \oint_{\partial \Omega_k} \mathbf{n} \phi f_{ki} \, ds dt + \int_{\Omega} \phi X_k \nabla f \, dv dt, \end{aligned}$$

wobei f_{ki} den Wert der Funktion f , ausgewertet auf der Seite der Komponente k des Interfaces darstellt. Ferner beachten wir, daß ∇X_k wie folgt definiert ist:

$$\int_{\Omega} \phi(\mathbf{x}, t) \nabla X_k \, dv dt = - \int_{\Omega} X_k \nabla \phi(\mathbf{x}, t) \, dv dt = - \int_{\Omega_k} \nabla \phi(\mathbf{x}, t) \, dv dt = - \oint_{\partial \Omega_k} \mathbf{n} \phi(\mathbf{x}, t) \, ds dt.$$

Wir erhalten dann

$$\int_{\Omega} \phi \nabla(X_k f) \, dv dt = \int_{\Omega} X_k \nabla f \phi \, dv dt + \int_{\Omega} f_{ki} \nabla X_k \phi \, dv dt. \quad (3.16)$$

Dies führt auf

$$\nabla(X_k f) = X_k \nabla f + f_{ki} \nabla X_k.$$

Dieses Ergebnis ähnelt der Produktregel für gewöhnliche Ableitungen. Es gibt hier jedoch einige Besonderheiten. Wendet man auf (3.16) das Ensemble-Mittel an, so folgt die *Gauß-Regel*

$$\overline{X_k \nabla f} = \overline{\nabla(X_k f)} - \overline{f \nabla X_k} = \nabla \overline{X_k f} - \overline{f_{ki} \nabla X_k}. \quad (3.17)$$

Eine ähnliche Rechnung führt auf die *Leibniz-Regel*

$$\overline{X_k \frac{\partial f}{\partial t}} = \overline{\frac{\partial(X_k f)}{\partial t}} - \overline{f \frac{\partial X_k}{\partial t}} = \frac{\partial \overline{X_k f}}{\partial t} - \overline{f_{ki} \frac{\partial X_k}{\partial t}}. \quad (3.18)$$

Man beachte, daß der zweite Term auf der rechten Seite in jeder dieser Beziehungen sich auf das Oberflächenmittel von f über das Interface, ausgewertet auf der Seite der Komponente k bezieht. Ferner gilt

$$\overline{f} \neq \overline{X_1 f} + \overline{X_2 f},$$

da $X_1 + X_2 = 0$ gilt, wenn \mathbf{x} ein Punkt auf dem Interface ist. Summieren wir (3.17) für $k = 1, 2$, so folgt

$$\overline{X_1 \nabla f} + \overline{X_2 \nabla f} = \nabla(\overline{X_1 f} + \overline{X_2 f}) + \overline{[f] \nabla X_1},$$

wobei $[f]$ den Sprung von der Seite von Komponente 1 zur Seite von Komponente 2 bezeichnet. Analog erhalten wir

$$\overline{X_1 \frac{\partial f}{\partial t}} + \overline{X_2 \frac{\partial f}{\partial t}} = \frac{\partial}{\partial t}(\overline{X_1 f} + \overline{X_2 f}) - \overline{[f] \frac{\partial X_1}{\partial t}}.$$

Alternative Mittelungen

In vielen Mehrkomponentenströmungen ergibt sich die Verwendung eines Mittelungszuganges aus der beobachteten räumlichen oder zeitlichen Variabilität (etwa das Zeitprofil einer Flüssigkeit durch vorbeiströmende Partikel; eine Fotografie kann sehr viele ähnliche Teilchen in einem Abstand, der gegenüber dem Strömungsgebiet klein ist, aufweisen. Wir betrachten nun drei alternative Mittelungskonzepte und diskutieren, in welcher Beziehung diese zur Ensemble-Mittelung stehen: die *statistische Mittelung* [5], die *Zeitmittelung* [9] und die *Volumenmittelung* [13].

Stationäre Strömungen sind transiente Strömungen, für welche die gemittelten Variablen stationär sind. Wenn wir eine Strömung in einem langen Zeitabschnitt betrachten und an einem gegebenen Ort \mathbf{x} , so können keine Unterschiede im zufälligen Verhalten des Strömungsfeldes zu unterschiedlichen Zeiten beobachtet werden. Verwenden wir die Information aus einem langen Zeitintervall T , um eine Statistik aufzustellen, dann sollte diese Statistik unabhängig von der Wahl von T sein. Hierbei wird implizit die Annahme verwendet, daß die Statistik dieselbe für eine andere Realisierung in diesem Zeitintervall ist. Dieses Ergebnis wird häufig *Ergodizität* genannt, das heißt, es bezieht sich auf zwei Mittelungsverfahren. Das Ergebnis ist jedoch eine Näherung, da der "Stichprobenumfang" gegen ∞ und damit die Länge des Zeitintervalls T gegen ∞ gehen muß. Wir behalten diese Näherungseigenschaft für die weitere Diskussion bei, anstatt noch einen weiteren Grenzprozeß einzuführen.

Eine ähnliche Interpretation gilt für das *Volumenmittel* von Strömungen, die statistisch räumlich gleichförmig oder homogen sind. Wir betrachten eine räumliche Skala, die im Vergleich zum Strömungsgebiet klein sei, aber groß gegenüber den Interface-Abständen. Enthalten Volumina dieser Größe die durch viele verteilte Einheiten (z.B. Partikel) erzeugte Variabilität, so kann die darin enthaltene Information zur Berechnung statistischer Größen verwendet werden. Hierbei wird wieder angenommen, daß die Variabilität innerhalb eines solchen Volumenanteils dieselbe wie in anderen Realisierungen ist.

Eine weitere nützliche Sichtweise der Ensemblemittelung besteht darin, die Strömung zwar als deterministisch aufzufassen, aber Zufälligkeit durch Unsicherheit in den Anfangsbedingungen einzuführen. Alternativ kann man die Strömung unter dem Einfluß kleiner Zufallskräfte betrachten. Besteht die disperse Komponente aus verschiedenen Einheiten wie Tropfen oder Partikeln, so kann es nützlich sein, diesen Verteilungen von Positionen, Geschwindigkeiten und Größen zuzuordnen. Es ist jedoch nicht offensichtlich, wie man innerhalb dieses Zugangs der *statistischen Mittelung* Fluktuationen der Flüssigkeitgeschwindigkeit erfaßt.

4.1. Mehrpartikel-Verteilungsfunktionen

Wir betrachten N diskrete Partikel und gehen von physikalisch identischen Kugeln aus, sodaß keine Partikelgrößen oder -orientierungen berücksichtigt werden müssen. Die Zufälligkeit in diesem System wird durch eine "Master"-Verteilungsfunktion

$$f^{(N)}(\mathbf{z}_1, \mathbf{v}_1, \mathbf{z}_2, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{z}_N, \mathbf{v}_N, t)$$

eingeführt, die grob gesprochen folgende Bedeutung hat:

$$f^{(N)} d\mathbf{z}_1 d\mathbf{v}_1 d\mathbf{z}_2 d\mathbf{v}_2 \cdots d\mathbf{z}_N d\mathbf{v}_N$$

ist die Wahrscheinlichkeit dafür, ein Partikel innerhalb des Abstandes $d\mathbf{z}_1$ um \mathbf{z}_1 mit einer Geschwindigkeit innerhalb $d\mathbf{v}_1$ um \mathbf{v}_1 und ein Partikel innerhalb des Abstandes $d\mathbf{z}_2$ um \mathbf{z}_2 mit einer Geschwindigkeit innerhalb $d\mathbf{v}_2$ um \mathbf{v}_2 etc. zur Zeit t während eines makroskopischen Prozesses \mathcal{M} zu finden. Beachte, daß hierbei angenommen wird, daß jedes Partikel mit einer Nummer identifiziert wird, und wir annehmen, daß Partikel i von Partikel j für $i \neq j$ unterschieden werden kann. Um diese Unterscheidung durch ein Ensemble ausdrücken zu können, betrachten wir einen Prozeß μ und nehmen an, die Position von Partikel i sei

$$\mathbf{X}_i = \boldsymbol{\chi}_i(\mathbf{X}_i, t; \mu),$$

wobei \mathbf{x}_i die Anfangsposition von Partikel i in der Realisierung μ sei. Dann hat die Funktion $f^{(N)}$ folgende präzisere Interpretation:

$$f^{(N)} d\mathbf{z}_1 d\mathbf{v}_1 \cdots d\mathbf{z}_N d\mathbf{v}_N = \text{Pr}_{\mathcal{E}} \left(\left| \mathbf{z}_1 - \boldsymbol{\chi}_1(\mathbf{X}_1, t; \mu) \right| < d\mathbf{z}_1, \left| \mathbf{v}_1 - \dot{\boldsymbol{\chi}}_1(\mathbf{X}_1, t; \mu) \right| < d\mathbf{v}_1, \dots, \right. \\ \left. \left| \mathbf{z}_N - \boldsymbol{\chi}_N(\mathbf{X}_N, t; \mu) \right| < d\mathbf{z}_N, \left| \mathbf{v}_N - \dot{\boldsymbol{\chi}}_N(\mathbf{X}_N, t; \mu) \right| < d\mathbf{v}_N \right),$$

wobei die Wahrscheinlichkeit Pr auf das Ensemble \mathcal{E} bezogen wird. Eine alternative Möglichkeit, dies auszudrücken, besteht darin, folgendes Subensemble einzuführen:

$$\bar{\mathcal{E}}^{(N)} := \left\{ \mu \in \mathcal{E} \left| \left| \mathbf{z}_1 - \boldsymbol{\chi}_1(\mathbf{X}_1, t; \mu) \right| < d\mathbf{z}_1, \left| \mathbf{v}_1 - \dot{\boldsymbol{\chi}}_1(\mathbf{X}_1, t; \mu) \right| < d\mathbf{v}_1, \right. \right. \\ \left. \left. \dots, \left| \mathbf{z}_N - \boldsymbol{\chi}_N(\mathbf{X}_N, t; \mu) \right| < d\mathbf{z}_N, \left| \mathbf{v}_N - \dot{\boldsymbol{\chi}}_N(\mathbf{X}_N, t; \mu) \right| < d\mathbf{v}_N \right\},$$

wobei $\bar{\mathcal{E}}^{(N)}$ natürlich von $\mathbf{z}_1, \mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{z}_N, \mathbf{v}_N$ und $d\mathbf{z}_1, d\mathbf{v}_1, \dots, d\mathbf{z}_N, d\mathbf{v}_N$ abhängt. Dann gilt

$$m(\bar{\mathcal{E}}^{(N)}) = f^{(N)} d\mathbf{z}_1 d\mathbf{v}_1 \cdots d\mathbf{z}_N d\mathbf{v}_N = \int_{\bar{\mathcal{E}}^{(N)}} dm(\mu),$$

woraus dieselbe Interpretation folgt.

Andere Verteilungsfunktionen können analog hergeleitet werden, zum Beispiel ist die Einzelpartikel-Verteilungsfunktion $f^{(1)}(\mathbf{z}, \mathbf{v}, t)$ dadurch definiert, daß man $f^{(1)} d\mathbf{z} d\mathbf{v}$ als die Wahrscheinlichkeit auffaßt, ein Teilchen innerhalb von $d\mathbf{z}$ um \mathbf{z} mit einer Geschwindigkeit $d\mathbf{v}$ um \mathbf{v} zu finden. Analog folgt eine Definition durch Unterensembles.

4.1.1. Nächster-Nachbar-Verteilungsfunktionen. Wir nehmen an, das Strömungsgebiet sei von N kugelförmigen Partikeln mit demselben Radius besetzt. Diese Partikel mögen die Mittelpunkts-Verteilungsfunktion $f^{(N)}(\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_N)$ besitzen. Aus Symmetriegründen folgt: ist (i_1, \dots, i_N) irgendeine Umordnung der Partikel, dann gilt

$$f^{(N)}(\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_N) = f^{(N)}(\mathbf{z}_{i_1}, \dots, \mathbf{z}_{i_N}).$$

Für jeden Punkt $\mathbf{x} \in \mathcal{B}$ existiert eine Umordnung, die die *Nähe* der Kugeln wiedergibt. Dies ist eine partielle Ordnung, da unter Umständen zwei oder mehr Kugeln denselben Abstand von \mathbf{x} haben können. In diesem Fall können die Ordnungszahlen willkürlich vergeben werden. Damit ist Kugel i_1 an Position $\mathbf{z}'_1 := \mathbf{z}_{i_1}$ am nächsten zu \mathbf{x} , Kugel i_2 an Position $\mathbf{z}'_2 := \mathbf{z}_{i_2}$ am zweitnächsten, usw. Wir beachten hierbei, daß diese Anordnung sowohl mit \mathbf{x} als auch mit t variiert. Die Nächster-Nachbar-Verteilungsfunktion $\hat{f}^{(N)}$ kann durch die ursprüngliche Verteilungsfunktion $f^{(N)}$ über

$$\hat{f}^{(N)}(\mathbf{x}, t; \mathbf{z}'_1, \dots, \mathbf{z}'_N) = f^{(N)}(\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_N)$$

wiedergegeben werden. Im folgenden werden wir die Abhängigkeit von t jedoch nicht explizit mitführen.

4.1.2. Statistische Mittelung. Ist eine Partikelverteilung an $\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_N$ gegeben, dann liefern die Bewegungsgleichungen die Geschwindigkeits- und Druckfelder als Funktionen der Partikelpositionen und der Zeit: $\mathbf{v}(\mathbf{x}|\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_N)$ und $p(\mathbf{x}|\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_N)$. Wir bilden nun das Mittel von \mathbf{v} , bezeichnet mit $\bar{\mathbf{v}}$, durch Multiplikation von $\mathbf{v}(\mathbf{x}|\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_N)$ mit $f^{(N)}$ und Integration über alle möglichen Partikelpositionen:

$$\bar{\mathbf{v}} = \int_{\mathbf{z}_1} \dots \int_{\mathbf{z}_N} f^{(N)}(\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_N) \mathbf{v}(\mathbf{x}|\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_N) d\mathbf{z}_N \cdots d\mathbf{z}_1. \quad (4.1)$$

Analog wird \bar{p} definiert.

Es ist auch nützlich, sogenannte *bedingte Mittel* einzuführen. Die Gleichung (4.1) kann dann wie folgt geschrieben werden:

$$\bar{\mathbf{v}} = \int_{\mathbf{z}_1} f^{(1)}(\mathbf{z}_1) \bar{\mathbf{v}}^{(1)}(\mathbf{x}|\mathbf{z}_1) d\mathbf{z}_1 = \int_{\mathbf{z}_1} \int_{\mathbf{z}_2} f^{(2)}(\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2) \bar{\mathbf{v}}^{(2)}(\mathbf{x}|\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2) d\mathbf{z}_2 d\mathbf{z}_1$$

und so weiter, wobei

$$\bar{\mathbf{v}}^{(1)}(\mathbf{x}|\mathbf{z}_1) = \frac{1}{f^{(1)}(\mathbf{z}_1)} \int_{\mathbf{z}_2} \dots \int_{\mathbf{z}_N} f^{(N)}(\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_N) \mathbf{v}(\mathbf{x}|\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_N) d\mathbf{z}_N \cdots d\mathbf{z}_2$$

die bedingte gemittelte Geschwindigkeit ist, wobei die Mittelung unter der Bedingung stattfindet, daß es eine Kugel mit Mittelpunkt \mathbf{z}_1 gibt. Hierbei nehmen wir an, daß $f^{(1)}(\mathbf{z}_1)$ die unbedingte Wahrscheinlichkeit dafür ist, daß sich ein beliebiger Kugelmittelpunkt an der Stelle \mathbf{z}_1 befindet, d.h.

$$f^{(1)}(\mathbf{z}_1) = \int_{\mathbf{z}_2} \dots \int_{\mathbf{z}_N} f^{(N)}(\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_N) d\mathbf{z}_N \cdots d\mathbf{z}_2.$$

Ähnlich definieren wir

$$\begin{aligned}\bar{\mathbf{v}}^{(2)}(\mathbf{x}|\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2) &:= \frac{1}{f^{(2)}(\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2)} \int_{\mathbf{z}_3} \cdots \int_{\mathbf{z}_N} f^{(N)}(\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_N) \mathbf{v}(\mathbf{x}|\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_N) d\mathbf{z}_N \cdots d\mathbf{z}_3, \\ f^{(2)}(\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2) &:= \int_{\mathbf{z}_3} \cdots \int_{\mathbf{z}_N} f^{(N)}(\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_N) d\mathbf{z}_N \cdots d\mathbf{z}_3.\end{aligned}$$

Die Funktionen $f^{(i)}$ werden *Einpartikel-Verteilungsfunktion*, *Zweipartikel-Verteilungsfunktion* usw. genannt. Wir beachten, daß beispielsweise gilt:

$$\bar{\mathbf{v}}^{(1)}(\mathbf{x}|\mathbf{z}_1) = \frac{1}{f^{(1)}(\mathbf{z}_1)} \int_{\mathbf{z}_2} f^{(2)}(\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2) \bar{\mathbf{v}}^{(2)}(\mathbf{x}|\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2) d\mathbf{z}_2.$$

Verwenden wir die Nächster-Nachbar-Verteilungsfunktion, so folgt

$$\bar{\mathbf{v}} = \int_{\mathbf{z}'_1} \cdots \int_{\mathbf{z}'_N} \hat{f}^{(N)}(\mathbf{x}, \mathbf{z}'_1, \dots, \mathbf{z}'_N) \mathbf{v}(\mathbf{x}|\mathbf{z}'_1, \dots, \mathbf{z}'_N) d\mathbf{z}'_N \cdots d\mathbf{z}'_1.$$

Hierzu gibt es auch bedingte Mittel und Verteilungen:

$$\bar{\mathbf{v}}(\mathbf{x}) = \int_{\mathbf{z}'_1} \hat{f}^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{z}'_1) \hat{\bar{\mathbf{v}}}^{(1)}(\mathbf{x}|\mathbf{z}'_1) d\mathbf{z}'_1 = \int_{\mathbf{z}'_1} \int_{\mathbf{z}'_2} \hat{f}^{(2)}(\mathbf{x}, \mathbf{z}'_1, \mathbf{z}'_2) \hat{\bar{\mathbf{v}}}^{(2)}(\mathbf{x}|\mathbf{z}'_1, \mathbf{z}'_2) d\mathbf{z}'_2 d\mathbf{z}'_1$$

usw., wobei

$$\hat{\bar{\mathbf{v}}}^{(1)}(\mathbf{x}|\mathbf{z}'_1) = \frac{1}{\hat{f}^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{z}'_1)} \int_{\mathbf{z}'_2} \cdots \int_{\mathbf{z}'_N} \hat{f}^{(N)}(\mathbf{x}, \mathbf{z}'_1, \dots, \mathbf{z}'_N) \mathbf{v}(\mathbf{x}|\mathbf{z}'_1, \dots, \mathbf{z}'_N) d\mathbf{z}'_N \cdots d\mathbf{z}'_2$$

die bedingte gemittelte Wahrscheinlichkeit ist, gemittelt unter der Bedingung, daß es eine Kugel mit dem Mittelpunkt an \mathbf{z}'_1 gibt.

4.1.3. Berechnung der Nächster-Nachbar-Verteilungsfunktion. Wir entwickeln einen Ansatz zur Berechnung der Funktionen $f^{(1)}$, $\hat{f}^{(1)}$ und $\hat{f}^{(2)}$. Eine gleichförmige Partikelkonzentration ist so definiert, daß $f^{(1)}(\mathbf{z}_1)$ konstant ist. Ist die volumetrische Konzentration $\alpha_p(\mathbf{x}, t)$, dann ist

$$f^{(1)}(\mathbf{z}_1) = \frac{3\alpha_p(\mathbf{x}, t)}{4\pi a^3}.$$

Für die Nächster-Nachbar-Verteilungen beachten wir, daß $\hat{f}^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{z}'_1) d\mathbf{z}'_1$ die Wahrscheinlichkeit dafür ist, daß die Kugel mit Mittelpunkt innerhalb $d\mathbf{z}'_1$ um \mathbf{z}'_1 die dem Punkt \mathbf{x} am nächsten gelegene ist, und daß $\hat{f}^{(2)}(\mathbf{x}, \mathbf{z}'_1, \mathbf{z}'_2) d\mathbf{z}'_1 d\mathbf{z}'_2$ die Wahrscheinlichkeit dafür ist, daß die Kugel mit Mittelpunkt innerhalb $d\mathbf{z}'_1$ um \mathbf{z}'_1 die dem Punkt \mathbf{x} am nächsten gelegene ist *und* daß die Kugel mit Mittelpunkt innerhalb $d\mathbf{z}'_2$ um \mathbf{z}'_2 die dem Punkt \mathbf{x} am zweitnächsten gelegene ist (und so weiter). Diese Verteilungen sind die Einpartikel- bzw. Zweipartikel-Nächster-Nachbar-Verteilungen.

Um nun einen Ausdruck für $\hat{f}^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{z}'_1)$ zu ermitteln, betrachten wir hier die Wahrscheinlichkeit dafür, daß *kein* Kugelmittelpunkt in einer Entfernung r um \mathbf{x} liegt, *und* daß es einen Kugelmittelpunkt in der Schale zwischen r und $r + dr$ um \mathbf{x} gibt. Dann ist $\hat{f}^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{z}'_1) d\mathbf{z}'_1$ die Wahrscheinlichkeit dafür, daß keine Kugel innerhalb r um \mathbf{x} *und* eine

Kugel innerhalb $d\mathbf{z}'_1$ um \mathbf{z}'_1 liegt. Nun addieren sich die Wahrscheinlichkeiten dafür, daß *keine* Kugel innerhalb r um \mathbf{x} liegt, und daß die *nächste* Kugel innerhalb r um \mathbf{x} liegt, zu eins:

$$\hat{f}^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{z}'_1) d\mathbf{z}'_1 = \left(1 - \int_{\{\mathbf{z}''_1 \mid |\mathbf{x} - \mathbf{z}''_1| < |\mathbf{x} - \mathbf{z}'_1|\}} \hat{f}^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{z}''_1) d\mathbf{z}''_1 \right) f^{(1)}(\mathbf{z}'_1) d\mathbf{z}'_1. \quad (4.2)$$

Für den zweiten Ausdruck können wir

$$f^{(1)}(\mathbf{z}'_1) = \frac{3\alpha_p(\mathbf{z}'_1)}{4\pi a^3}$$

verwenden. Nehmen wir $\alpha_p = \text{const.}$ an, dann ist $\hat{f}^{(1)}$ nur eine Funktion von $r_1 := |\mathbf{x} - \mathbf{z}'_1|$. Ersetzen wir dann $d\mathbf{z}'_1$ durch $4\pi(r'_1)^2 dr'_1$ und $d\mathbf{z}''_1$ durch $4\pi(r'_1)^2 dr'_1$, dann ist die linke Seite von (4.2) gerade das Differential der rechten.

In den radialen Koordinaten lautet (4.2)

$$\hat{f}^{(1)} \cdot 4\pi r_1^2 dr_1 = \left(1 - 4\pi \int_0^{r_1} \hat{f}^{(1)}(r'_1)(r'_1)^2 dr'_1 \right) \cdot 4\pi r_1^2 dr_1 \cdot f^{(1)}.$$

Dies ist äquivalent zu

$$\frac{d}{dr_1} \ln \left(1 - 4\pi \int_0^{r_1} \hat{f}^{(1)}(r'_1)(r'_1)^2 dr'_1 \right) = -4\pi f^{(1)} r_1^2,$$

woraus

$$1 - 4\pi \int_0^{r_1} \hat{f}^{(1)}(r'_1)(r'_1)^2 dr'_1 = \exp \left(-\frac{4}{3} \pi f^{(1)} r_1^3 \right)$$

folgt. Hiermit erhalten wir

$$\hat{f}^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{z}'_1) = \exp \left(-\frac{4}{3} \pi f^{(1)}(\mathbf{z}'_1) |\mathbf{x} - \mathbf{z}'_1|^3 \right) f^{(1)}(\mathbf{z}'_1)$$

und unter Verwendung von α_p

$$\hat{f}^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{z}'_1) = \frac{3\alpha_p}{4\pi a^3} \exp \left(-\alpha_p \left[\frac{|\mathbf{x} - \mathbf{z}'_1|}{a} \right]^3 \right).$$

Eine ähnliche Herleitung gilt für die Zwei-Partikel-Verteilung. Diese Verteilung ist nützlich, um Konvergenzresultate für Mittel von Einpartikel-Verteilungen zu erzielen. Die Verteilungsfunktion für zwei nächste Nachbarn, $\hat{f}^{(2)}(\mathbf{x}, \mathbf{z}'_1, \mathbf{z}'_2)$, verschwindet für $|\mathbf{x} - \mathbf{z}'_2| \leq |\mathbf{x} - \mathbf{z}'_1|$. Für $|\mathbf{x} - \mathbf{z}'_2| > |\mathbf{x} - \mathbf{z}'_1|$ ist $\hat{f}^{(2)}(\mathbf{x}, \mathbf{z}'_1, \mathbf{z}'_2) d\mathbf{z}'_1 d\mathbf{z}'_2$ die Wahrscheinlichkeit dafür, daß die Kugel mit Mittelpunkt innerhalb $d\mathbf{z}'_1$ um \mathbf{z}'_1 die \mathbf{x} nächste *und* die Kugel mit Mittelpunkt innerhalb $d\mathbf{z}'_2$ um \mathbf{z}'_2 die \mathbf{x} zweitnächste ist. Dies kann ausgerechnet werden über die bedingte Wahrscheinlichkeit dafür, daß die zweitnächste Kugel zu \mathbf{x} innerhalb $d\mathbf{z}'_2$ um \mathbf{z}'_2 ist, vorausgesetzt, daß an \mathbf{z}'_1 eine Kugel sitzt. Dies wiederum kann ähnlich wie die oben berechnete Wahrscheinlichkeitsdichte ausgerechnet werden. Zunächst gilt:

$$\hat{f}^{(2)}(\mathbf{x}, \mathbf{z}'_2 | \mathbf{z}'_1) d\mathbf{z}'_2$$

$$= \begin{cases} 0 & \text{falls } |\mathbf{x} - \mathbf{z}'_2| < |\mathbf{x} - \mathbf{z}'_1|, \\ \left(1 - \int_{\{x \mid |\mathbf{x} - \mathbf{z}'_1| \leq |\mathbf{x} - \mathbf{z}'_2| \leq |\mathbf{x} - \mathbf{z}'_1|\}} \hat{f}^{(2)}(\mathbf{x}, \mathbf{z}'_2 | \mathbf{z}'_1) d\mathbf{z}'_2\right) f^1(\mathbf{z}'_2) d\mathbf{z}'_2 & \text{falls } |\mathbf{x} - \mathbf{z}'_2| > |\mathbf{x} - \mathbf{z}'_1|. \end{cases}$$

Nehmen wir dann $\alpha_p = \text{const.}$ an, so folgt, daß $\hat{f}^{(2)}$ nur eine Funktion von $r_2 = |\mathbf{x} - \mathbf{z}'_2|$ ist. Dann erhalten wir

$$\hat{f}^{(2)}(r_2 | \mathbf{z}'_1) = \left(1 - 4\pi \int_{r_1}^{r_2} \hat{f}^{(2)}(r'_2 | \mathbf{z}'_1) (r'_2)^2 dr'_2\right) f^{(1)}$$

und entsprechend dem obigen Vorgehen

$$\hat{f}^{(2)}(\mathbf{x}, \mathbf{z}'_2 | \mathbf{z}'_1) = \frac{3\alpha_p}{4\pi a^3} \exp\left(\alpha_p \left\{ \left[\frac{|\mathbf{x} - \mathbf{z}'_1|}{a}\right]^3 - \left[\frac{|\mathbf{x} - \mathbf{z}'_2|}{a}\right]^3 \right\}\right).$$

Damit gilt schließlich

$$\hat{f}^{(2)}(\mathbf{x}, \mathbf{z}'_2 | \mathbf{z}'_1) = \begin{cases} 0 & \text{falls } |\mathbf{x} - \mathbf{z}'_2| < |\mathbf{x} - \mathbf{z}'_1|, \\ \left(\frac{3\alpha_p}{4\pi a^3}\right)^2 \exp\left(-\alpha_p \left[\frac{|\mathbf{x} - \mathbf{z}'_2|}{a}\right]^3\right) & \text{sonst.} \end{cases} \quad (4.3)$$

4.1.4. Angenäherte Wahrscheinlichkeitsdichten. Der Begriff der bedingten Volumenfraktion während der bedingten Mittelung ist interessant. Hierzu betrachten wir die Größen

$$\begin{aligned} \alpha_p^{(1)}(\mathbf{x}, t | \mathbf{z}) &= \overline{X_p(\mathbf{x}, t | \mathbf{z}, \mathbf{z}_2, \dots, \mathbf{z}_N)}^{(1)} \\ &= \int_{\mathbf{z}_2} \cdots \int_{\mathbf{z}_N} X_p(\mathbf{x}, t | \mathbf{z}, \mathbf{z}_2, \dots, \mathbf{z}_N) f^{(N)}(\mathbf{z}, \mathbf{z}_2, \dots, \mathbf{z}_N) d\mathbf{z}_N \cdots d\mathbf{z}_2, \\ \alpha_p^{(2)}(\mathbf{x}, t | \mathbf{z}, \mathbf{z}_2) &= \overline{X_p(\mathbf{x}, t | \mathbf{z}, \mathbf{z}_2, \dots, \mathbf{z}_N)}^{(2)} \\ &= \int_{\mathbf{z}_3} \cdots \int_{\mathbf{z}_N} X_p(\mathbf{x}, t | \mathbf{z}, \mathbf{z}_2, \dots, \mathbf{z}_N) f^{(N)}(\mathbf{z}, \mathbf{z}_2, \dots, \mathbf{z}_N) d\mathbf{z}_N \cdots d\mathbf{z}_3. \end{aligned}$$

Beachte, daß für $|\mathbf{z} - \mathbf{z}_2| < a$ im ersten Integral $f^{(N)} = 0$ gilt. Daher gilt dort $\alpha_p^{(2)}(\mathbf{x}, t | \mathbf{z}, \mathbf{z}_2) = 0$. Nehmen wir ferner die Anzahldichte

$$f^{(2)}(\mathbf{z}, \mathbf{z}_2, t) = \begin{cases} 0 & \text{falls } |\mathbf{z} - \mathbf{z}_2| < 2a, \\ \bar{f} = \text{const.} & \text{sonst} \end{cases}$$

an, so können wir $\alpha_p^{(1)}(\mathbf{x}, t | \mathbf{z})$ berechnen, falls wir zunächst folgendes beachten:

$$\alpha_p^{(1)}(\mathbf{x}, t | \mathbf{z}) = \begin{cases} 1 & \text{falls } |\mathbf{x} - \mathbf{z}| < a, \\ \frac{4}{3}\pi a^3 \bar{f} & \text{falls } |\mathbf{x} - \mathbf{z}| > 3a. \end{cases}$$

Für $a < |\mathbf{x} - \mathbf{z}| < 3a$ kann die Partikelvolumenfraktion berechnet werden, indem man das Volumen betrachtet, in dem der Kugelmittelpunkt unter der Voraussetzung $|\mathbf{x} - \mathbf{z}| <$

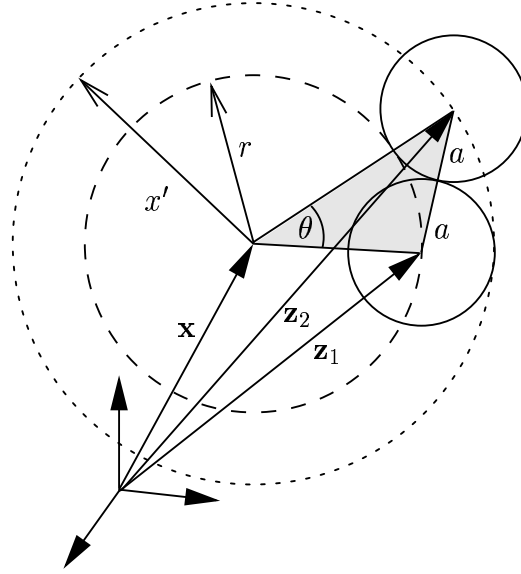


ABBILDUNG 4.1. Ausgeschlossenes Volumen: Der zweitnächste Nachbar (mit Mittelpunkt \mathbf{z}_2) kann nicht auf der gesamten Kugeloberfläche mit Radius x' liegen. Der Winkel $\theta(x', r)$ ist durch das grau unterlegte Dreieck definiert.

$3a$ liegen könnte. Dieses Volumen ergibt geteilt durch $4\pi a^3/3$ und multipliziert mit der Anzahldichte \bar{f} die Volumenfraktion. Sei nun $|\mathbf{x} - \mathbf{z}| = x'$. Das Volumen ist

$$V(x') = \int_{2a-x'}^a \int_0^{\theta(x', r)} \int_0^{2\pi} r^2 \sin \theta \, dr \, d\theta \, d\phi = 2\pi \int_{2a-x'}^a r^2 \left(1 - \cos(\theta(x', r))\right) dr,$$

wobei $\theta(x', r)$ der in Abb. 4.1 gegebene Winkel ist. Dieser Winkel ergibt sich durch Anwendung des Kosinussatzes auf das grau unterlegte Dreieck. Wir erhalten

$$\cos(\pi - \theta) = -\cos \theta = \frac{4a^2 - (x')^2 - r^2}{2rx'}$$

und somit

$$V(x') = 2\pi \frac{12a^4 + \dots}{2x'}.$$

Somit ist die Volumenfraktion

$$\alpha_p^{(1)} = \frac{3(12a^4 + \dots)}{4a^3 x'} \bar{f}.$$

Ist $x' = a$, dann folgt $\alpha_p^{(1)} = 0$, und für $x' = 3a$ gilt

$$\alpha_p^{(1)} = \frac{4\pi a^3}{3} \bar{f}.$$

4.1.5. Konvergenzresultate. Die bisher eingeführten Mittel werden dazu verwendet, Aussagen über konstitutive Gleichungen aus exakten Strömungen herzuleiten. Dieses Vorgehen ist jedoch mit gewissen Schwierigkeiten behaftet. Wir verdeutlichen dies am Beispiel einer Funktion

$$g_1(\mathbf{x}, t | \mathbf{z}'_1, \dots, \mathbf{z}'_N) = g(\mathbf{x}, t | \mathbf{z}'_1) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{z}'_2|^\nu}\right),$$

wobei g_1 von der Ordnung 1 sei. Wir beachten, daß der gewöhnliche (ungeordnete) Ausdruck für die Wahrscheinlichkeitsdichte zu Mitteln führt, die in unbeschränkten Strömungen zu Konvergenzproblemen führen. Das Mittel von g ist

$$\begin{aligned} \bar{g}(\mathbf{x}, t) &= \int_{\mathbf{z}_1} \cdots \int_{\mathbf{z}_N} f^{(N)}(\mathbf{x}, \mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_N) g(\mathbf{x}, t | \mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_N) d\mathbf{z}_N \cdots d\mathbf{z}_1 \\ &= \int_{\mathbf{z}_1} f^{(1)}(\mathbf{z}_1) g_1(\mathbf{x}, t | \mathbf{z}_1) d\mathbf{z}_1 + E, \end{aligned}$$

wobei der Fehler E von allen Kugeln außer derjenigen mit Mittelpunkt an \mathbf{z}_1 verursacht wird. Ist $f^{(1)}$ konstant, so wird das Integral nicht konvergieren; es wird auch dann nicht konvergieren, wenn die Verteilung nicht schnell genug abklingt.

Mit der Nächster-Nachbar-Verteilungsfunktion ist das Mittel von g wie folgt gegeben:

$$\begin{aligned} \hat{g}(\mathbf{x}, t) &= \int_{\mathbf{z}'_1} \cdots \int_{\mathbf{z}'_N} \hat{f}^{(N)}(\mathbf{x}, \mathbf{z}'_1, \dots, \mathbf{z}'_N) g(\mathbf{x}, t | \mathbf{z}'_1, \dots, \mathbf{z}'_N) d\mathbf{z}'_N \cdots d\mathbf{z}'_1 \\ &= \int_{\mathbf{z}'_1} \hat{f}^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{z}'_1) g_1(\mathbf{x}, t | \mathbf{z}'_1) d\mathbf{z}'_1 + \hat{E}, \\ \hat{E} &= \mathcal{O}\left(\int_{\mathbf{z}'_1} \int_{\mathbf{z}'_2} \frac{\hat{f}^{(2)}(\mathbf{x}, \mathbf{z}'_1, \mathbf{z}'_2)}{|\mathbf{x} - \mathbf{z}'_2|^\nu} d\mathbf{z}'_2 d\mathbf{z}'_1\right). \end{aligned}$$

Mit (4.3) folgt

$$\hat{E} = \mathcal{O}\left(\int_0^\infty \int_{r_1}^\infty (f^{(1)})^2 \exp\left(-\frac{4}{3}\pi f^{(1)} r_2^3\right) 4\pi r_1^3 4\pi r_2^{3-\nu} dr_1 dr_2\right).$$

Mit der Variablentransformation $r'_1 = (f^{(1)})^{1/3} r_1$ und $r'_2 = (f^{(1)})^{1/3} r_2$ erhalten wir $\hat{E} = \mathcal{O}((f^{(1)})^{\nu/3})$. Damit kann eine Ein-Kugel-Berechnung Ergebnisse liefern, die für niedrig konzentrierte Strömungen, bei welchen $f^{(1)}$ klein ist, genau sind.

4.1.6. Zeitmittelung. Wir definieren die elementaren Borel-Mengen

$$\bar{\mathcal{E}}(t, F) := \{\mu \mid f(\mathbf{x}, t; \mu) \leq F\}, \quad \bar{\mathcal{E}}(t - \tau, F) := \{\mu \mid f(\mathbf{x}, t - \tau; \mu) \leq F\}.$$

Wir nehmen an: ist $\mu \in \bar{\mathcal{E}}(t, F)$, dann liefert das durch Verschiebung des Ursprungs erzeugte Feld einen weiteren Prozeß aus dem Ensemble. Ist $f(\mathbf{x}, t; \mu)$ ein solcher Prozeß, dann ist μ_τ definiert durch $f(\mathbf{x}, t; \mu_\tau) := f(\mathbf{x}, t - \tau; \mu)$ ein Prozeß in $\bar{\mathcal{E}}(t - \tau, F)$. Damit gilt $\bar{\mathcal{E}}(t, F) \subseteq$

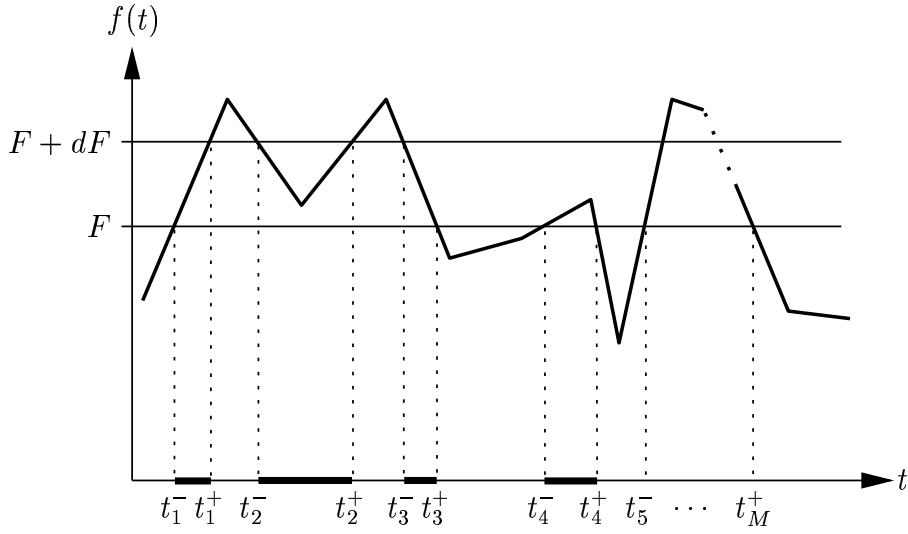


ABBILDUNG 4.2. Die Zeitgeschichte einer Realisierung $f(t)$ mit den Intervallen, für die $F \leq f(t) \leq F + dF$ gilt.

$\bar{\mathcal{E}}(t - \tau, F)$. Es ist auch klar, daß $\bar{\mathcal{E}}(t - \tau, F) \subseteq \bar{\mathcal{E}}(t, F)$ gilt, und somit $\bar{\mathcal{E}}(t - \tau, F) = \bar{\mathcal{E}}(t, F)$, d.h. die Borel-Mengen und ihre Maße sind zeitunabhängig. Das Mittel von f ist zunächst

$$\bar{f}(\mathbf{x}, t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^{N-1} F_i m(\bar{\mathcal{E}}(\mathbf{x}, t; F_i; dF_i)).$$

Da $m(\dots)$ von t unabhängig ist, ist auch \bar{f} von t unabhängig.

Wir berechnen nun eine Näherung an \bar{f} unter Verwendung des Gesetzes der großen Zahlen., um $m(\bar{\mathcal{E}}(\mathbf{x}, F, dF))$ anzunähern, d.h. wir wollen die Wahrscheinlichkeit dafür abschätzen, daß wir eine Realisierung erhalten derart, daß f in einem Intervall $F \leq f(\mathbf{x}, t; \mu) \leq F + dF$ liegt. Wir betrachten hierzu die Zeitgeschichte einer Realisierung f , siehe Abbildung 4.2.

Sind F und dF gegeben, so können wir Zeitintervalle

$$t_1^-(F, dF) \leq t \leq t_1^+(F, dF), t_2^-(F, dF) \leq t \leq t_2^+(F, dF), \dots, \\ t_M^-(F, dF) \leq t \leq t_M^+(F, dF)$$

derart finden, daß für $t_m^-(F, dF) \leq t \leq t_m^+(F, dF)$ gilt:

$$F \leq f(\mathbf{x}, t; \mu) \leq F + dF.$$

Da der makroskopische Prozeß zeitunabhängig ist, können wir Stichproben bilden, indem wir zufällig Zeiten τ in einem Intervall $t - T \leq \tau \leq t$ wählen, das hinreichend groß sein soll, sodaß das Gesetz der großen Zahlen gilt. Ist die Stichprobenverteilung gleichförmig, so ist die Wahrscheinlichkeit für eine Stichprobenziehung aus der Menge $m(\bar{\mathcal{E}}(\mathbf{x}, F, dF))$

gegeben durch

$$\frac{1}{T}\Delta_m t(F, dF) := \frac{1}{T}(t_m^+(F, dF) - t_m^-(F, dF)).$$

Das Gesetz der großen Zahlen liefert dann

$$m(\bar{\mathcal{E}}(\mathbf{x}, F, dF)) \approx \sum_{m=1}^M \frac{1}{T}\Delta_m t(F, dF).$$

Das Mittel von f ist dann

$$\bar{f}(\mathbf{x}, t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^{N-1} F_i m(\bar{\mathcal{E}}(\mathbf{x}, t; F_i, dF_i)) = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^{N-1} F_i \sum_{m=1}^M \frac{1}{T}\Delta_m t(F_i, dF_i). \quad (4.4)$$

Da F_i entweder gleich $f(\mathbf{x}, t_i^-; \mu)$ oder gleich $f(\mathbf{x}, t_i^+; \mu)$ ist, konvergiert die Doppelsumme (4.4) gegen das Zeitintegral:

$$\begin{aligned} \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^{N-1} F_i \sum_{m=1}^M \frac{1}{T}\Delta_m t(F_i, dF_i) &= \frac{1}{T} \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{m=1}^M f(\mathbf{x}, t_m^*; \mu) \Delta_m t(F_i, dF_i) \\ &= \frac{1}{T} \int_{t-T}^t f(\mathbf{x}, \tau; \mu) d\tau. \end{aligned}$$

Damit ist

$$\bar{f}^T = \frac{1}{T} \int_{t-T}^t f(\mathbf{x}, \tau; \mu) d\tau$$

das *Zeitmittel* von f . Die Interpretation ist die folgende: aus einer Realisierung eines stationären makroskopischen Prozesses folgt eine unendliche Anzahl anderer Realisierungen, wenn man den Ursprung um eine beliebige Differenz τ verschiebt. Somit können wir aus dieser Realisierung beliebig viele weitere Realisierungen erhalten. Grob gesagt ist dann die Wahrscheinlichkeit dafür, f zu beobachten, proportional zu der Zeit, die f in der Nähe jedes Wertes verbringt, so daß die Wichtung in der Summation (oder Integration) gleich $d\tau/T$ ist.

Vom praktischen Standpunkt aus muß T hinreichend groß sein, sodaß eine große Anzahl unabhängiger Stichproben von f während des Zeitintervalls möglich ist. Die Verwendung des Zeitmittels hat den Vorteil, daß man nur *eine* detaillierte Stichprobe durchführen muß, um Mittelwerte zu erhalten. Dies kann für den Experimentator u.U. eine große Erleichterung sein.

4.2. Volumenmittelung

Wir betrachten die Borel-Mengen $\bar{\mathcal{E}}(\mathbf{x}, t; F, dF)$, die von der Raumvariablen \mathbf{x} unabhängig sind. Ist $\mu \in \bar{\mathcal{E}}(t; F, dF)$, dann können wir andere Realisierungen μ_η heranziehen mit $f(\mathbf{x}, t; \mu_\eta) = f(\mathbf{x} + \boldsymbol{\eta}, t; \mu)$. Ähnlich wie bei der Zeitmittelung erhalten wir, daß wir \bar{f} nähern können durch Integration über das Unterensemble, das durch μ_η für

$\boldsymbol{\eta} \in V$ repräsentiert wird, wobei V ein hinreichend großes Volumen ist. Mit entsprechender gleichförmiger Wichtung erhalten wir das Volumenmittel

$$\overline{f}^V = \frac{1}{V} \int_V f(\mathbf{x} + \boldsymbol{\eta}, t; \mu) d\mathbf{x}_\eta.$$

Wie bei dem Zeitmittel muß das Volumenmittel aus Volumina gebildet werden, die hinreichend viele Variationen in f beinhalten, sodaß das Gesetz der großen Zahlen angewandt werden kann.

4.2.1. Gauß- und Leibniz-Regeln für Zeit- und Volumenmittelung. Die Herleitung der Gauß- und Leibniz-Regeln für die Zeit- und die Volumenmittelung ist schwieriger als bei der Ensemblemittelung, da wir nicht über eine Variable mitteln, die die Teilchenpositionen verfolgt (X_k), sondern über eine unabhängige Variable. Die Gauß- und Leibniz-Regeln beschreiben die Vertauschbarkeit der Ableitungen bezüglich dieser Variablen mit dem Mittelungsoperator.

Wir betrachten zunächst die Zeitmittelung. Sei $f(t)$ stückweise stetig mit Sprüngen an t_1, t_2, \dots . Ferner sei angenommen, der Raumpunkt fülle für $t_1 < t < t_2, t_3 < t < t_4, \dots, t_{2n-1} < t < t_{2n}$ die Komponente k aus. Dann ist

$$\overline{X_k f(t)}^T = \frac{1}{T} \int_{t-T}^t X_k f(\tau) d\tau = \frac{1}{T} \left(\int_{t-T}^{t_2} f(\tau) d\tau + \int_{t_3}^{t_4} f(\tau) d\tau + \dots + \int_{t_{2n-1}}^t f(\tau) d\tau \right),$$

wobei wir der Einfachheit halber $t_1 < t - T < t_2$ und $t_{2n-1} < t < t_{2n}$ gewählt haben. Dann gilt

$$\frac{\partial \overline{X_k f}}{\partial t} = f(t) - f(t - T).$$

(Die anderen Fälle können durch

$$\frac{\partial \overline{X_k f}^T}{\partial t} = X_k f(t) - X_k(t - T) f(t - T)$$

dargestellt werden.) Ferner beachten wir

$$\begin{aligned} \overline{X_k \frac{\partial f}{\partial t}}^T &= \frac{1}{T} \int_{t-T}^t X_k \frac{\partial f}{\partial \tau} d\tau \\ &= \frac{1}{T} \left(\int_{t-T}^{t_2} \frac{\partial f}{\partial \tau} d\tau + \int_{t_3}^{t_4} \frac{\partial f}{\partial \tau} d\tau + \dots + \int_{t_{2n-1}}^t \frac{\partial f}{\partial \tau} d\tau \right) \\ &= \frac{1}{T} (f(t) - f(t_{2n-1}^-) + \dots - f(t_3^-) + f(t_2^+) - f(t - T)). \end{aligned}$$

Vergleichen wir beide Ausdrücke, so folgt

$$\frac{\partial \overline{X_k f}^T}{\partial t} = \overline{X_k \frac{\partial f}{\partial t}}^T - \frac{1}{T} (-f(t_{2n-1}^-) + \dots - f(t_3^-) + f(t_2^+)).$$

Wir beachten, daß $f(t_j^+)$ und $f(t_j^-)$ die Werte von $f(t)$ sind, wenn das Interface am Mittelungspunkt ist. Wir betrachten nun den Ausdruck $\mathbf{n}_k \cdot \mathbf{v}_i / |\mathbf{n}_k \cdot \mathbf{v}_i|$, wobei \mathbf{n}_k der von Komponente k weg weisende Einheitsvektor ist. Dann gilt

$$\frac{\mathbf{n}_k \cdot \mathbf{v}_i}{|\mathbf{n}_k \cdot \mathbf{v}_i|} \begin{cases} > 0, & \text{falls Komponente } k \text{ am Mittelungspunkt "ankommt"}, \\ < 0, & \text{falls Komponente } k \text{ den Mittelungspunkt "verläßt"}. \end{cases}$$

Somit gilt

$$\frac{\partial \overline{X_k f}^T}{\partial t} = \overline{X_k \frac{\partial f}{\partial t}}^T - \sum_{t_j \in (t-T, t)} \frac{1}{T} \frac{\mathbf{n}_k \cdot \mathbf{v}_i}{|\mathbf{n}_k \cdot \mathbf{v}_i|} f(t_j^k), \quad (4.5)$$

wobei $f(t_j^k)$ die Werte von f auf der k -Seite des Interfaces bezeichnet. Die Gleichung (4.5) ist das Analogon zu (3.18) und wird gelegentlich *Leibniz-Regel für die Zeitmittelung* genannt. Das analoge Resultat für räumliche Gradienten wird dadurch verkompliziert, daß t_j von \mathbf{x} abhängt. Um dies einzusehen, verschieben wir \mathbf{x} etwas im Raum; dann wird sich auch die "Ankunftszeit" des Interfaces ändern. Wir benötigen eine Beziehung für ∇t_j . Wir nehmen hierzu zunächst an, die Interface-Position sei durch eine Gleichung $F(\mathbf{x}, t) = 0$ gegeben. Differentiation nach t liefert das Standard-Resultat

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \mathbf{v}_i \cdot \nabla F = 0,$$

während Gradientenbildung

$$\frac{\partial F}{\partial t} \nabla t_j + \nabla F = 0$$

liefert. Durch Auflösung nach ∇t_j folgt

$$\nabla t_j = -\frac{1}{\partial F / \partial t} \nabla F = \frac{1}{\mathbf{v}_i \cdot \nabla F} \nabla F = \frac{1}{\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{n}_k} \mathbf{n}_k.$$

Wir berechnen nun das Zeitmittel des Gradienten von f :

$$\overline{X_k \nabla f(t)}^T = \frac{1}{T} \left(\int_{t-T}^{t_2} \nabla f(\tau) d\tau + \int_{t_3}^{t_4} \nabla f(\tau) d\tau + \cdots + \int_{t_{2n-1}}^t \nabla f(\tau) d\tau \right). \quad (4.6)$$

Der Gradient des Zeitmittels von $X_k f(t)$ ist hingegen

$$\begin{aligned} \nabla \overline{X_k f(t)}^T &= \nabla \left(\frac{1}{T} \left[\int_{t-T}^{t_2} f(\tau) d\tau + \int_{t_3}^{t_4} f(\tau) d\tau + \cdots + \int_{t_{2n-1}}^t f(\tau) d\tau \right] \right) \\ &= \frac{1}{T} \left(\int_{t-T}^{t_2} \nabla f(\tau) d\tau + \int_{t_3}^{t_4} \nabla f(\tau) d\tau + \cdots + \int_{t_{2n-1}}^t \nabla f(\tau) d\tau \right) \\ &\quad + \frac{1}{T} (\nabla t_2 f(t_2^-) - \nabla t_3 f(t_3^+) + \nabla t_4 f(t_4^-) + \cdots - \nabla t_{2n-1} f(t_{2n-1}^-)). \end{aligned}$$

Verwenden wir (4.6), so folgt die zu (3.17) analoge Formel

$$\nabla \overline{X_k f(t)}^T = \overline{X_k \nabla f(t)}^T + \frac{1}{T} \sum_{t_j \in (t-T, t)} \frac{\mathbf{n}_k}{T |\mathbf{n}_k \cdot \mathbf{v}_i|} f(t_j^k), \quad (4.7)$$

welche sinngemäß als *Gauß-Regel der Zeitmittelung* bezeichnet wird.

Wir betrachten nun die Volumenmittelung. Hierbei gilt

$$\overline{X_k f}^V(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{V} \int_V X_k f(\mathbf{x} + \boldsymbol{\eta}, t) d\mathbf{x}_\eta = \frac{1}{V} \int_{V_k(\mathbf{x}, t)} f(\mathbf{x}', t) d\mathbf{x}'.$$

Das Volumenmittel von $X_k \nabla f$ ist

$$\begin{aligned} \overline{X_k \nabla f}^V &= \frac{1}{V} \int_V X_k \nabla f(\mathbf{x} + \boldsymbol{\eta}, t) d\mathbf{x}_\eta = \frac{1}{V} \int_{V_k(\mathbf{x}, t)} \nabla f(\mathbf{x}', t) d\mathbf{x}' \\ &= \frac{1}{V} \int_{S_k(\mathbf{x}, t)} \mathbf{n} f(\mathbf{x}', t) ds' + \frac{1}{V} \int_{S_i(\mathbf{x}, t)} \mathbf{n}_k f_{ki}(\mathbf{x}', t) ds', \end{aligned}$$

wobei $S_k(\mathbf{x}, t)$ derjenige Teil des Randes von V ist, der innerhalb Komponente k liegt, und S_i das Interface innerhalb von V ist. Mit

$$\begin{aligned} \nabla \overline{X_k f}^V &= \frac{1}{V} \nabla \left(\int_V X_k f(\mathbf{x} + \boldsymbol{\eta}, t) d\mathbf{x}_\eta \right) = \frac{1}{V} \nabla \left(\int_{V_k(\mathbf{x}, t)} f(\mathbf{x}', t) d\mathbf{x}' \right) \\ &= \frac{1}{V} \int_{S_k(\mathbf{x}, t)} \mathbf{n} f(\mathbf{x}', t) ds' \end{aligned}$$

folgt dann die *Gauß-Regel für die Volumenmittelung*

$$\overline{X_k \nabla f}^V = \nabla \overline{X_k f}^V + \frac{1}{V} \int_{S_i(\mathbf{x}, t)} \mathbf{n}_k f_{ki}(\mathbf{x}', t) ds'. \quad (4.8)$$

Für die Zeitableitung betrachten wir

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \overline{X_k f}^V &= \frac{1}{V} \frac{\partial}{\partial t} \left(\int_V X_k f(\mathbf{x} + \boldsymbol{\eta}, t) d\mathbf{x}_\eta \right) = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial}{\partial t} \int_{V_k(\mathbf{x}, t)} f(\mathbf{x}', t) d\mathbf{x}' \right) \\ &= \frac{1}{V} \int_{V_k(\mathbf{x}, t)} \frac{\partial}{\partial t} f(\mathbf{x}', t) d\mathbf{x}' + \frac{1}{V} \int_{S_i(\mathbf{x}, t)} \mathbf{n}_k \cdot \mathbf{v}_i f(\mathbf{x}', t) ds', \end{aligned}$$

wobei das Reynoldssche Transporttheorem [1] verwendet wurde, um die Zeitableitung innerhalb des Integrals über ein bewegtes Volumen zu bilden. Mit

$$\frac{1}{V} \int_{V_k(\mathbf{x}, t)} \frac{\partial}{\partial t} f(\mathbf{x}', t) d\mathbf{x}' = \overline{X_k \frac{\partial f}{\partial t}}^V$$

folgt dann die *Leibniz-Regel der Volumenmittelung*

$$\frac{\partial}{\partial t} \overline{X_k f}^V = \overline{X_k \frac{\partial f}{\partial t}}^V + \int_{S_i(\mathbf{x}, t)} \mathbf{n}_k \cdot \mathbf{v}_i f(\mathbf{x}', t) ds'. \quad (4.9)$$

Gemittelte Gleichungen

5.1. Mittelung von Bilanzgleichungen

Mittel von Bilanzgleichungen erhalten wir, indem wir das Produkt der Bilanzgleichungen mit X_k bilden und dann mitteln. Für die allgemeinen Bilanzgleichungen aus Abschnitt 3.1 folgt dann

$$\frac{\partial \overline{X_k \rho \Psi}}{\partial t} + \nabla \cdot \overline{X_k \rho \Psi \mathbf{v}} - \nabla \cdot \overline{X_k \mathbf{J}} - \overline{X_k \rho f} = \overline{\rho \Psi \left(\frac{\partial X_k}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla X_k \right)} - \overline{\mathbf{J} \cdot \nabla X_k}. \quad (5.1)$$

Hierbei ist Ψ die erhaltene Größe, \mathbf{J} ihr molekularer (oder diffusiver) Fluß und f ihre Quelldichte. Die exakten Erhaltungs- bzw. Sprunggleichungen sind dann

$$\frac{\partial(\rho\Psi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\Psi\mathbf{v}) = \nabla \cdot \mathbf{J} + \rho f, \quad [\rho\Psi(\mathbf{v} - \mathbf{v}_i) + \mathbf{J}] \cdot \mathbf{n} = m.$$

Subtrahieren wir das Mittel von $\rho\Psi$ und beachten wir die topologische Gleichung

$$\frac{\partial X_k}{\partial t} + \mathbf{v}_i \cdot \nabla X_k = 0,$$

so folgt, daß die rechte Seite von (5.1) den Wert

$$\overline{(\rho\Psi(\mathbf{v} - \mathbf{v}_i) - \mathbf{J}) \cdot \nabla X_k}$$

hat. Dies ist der Interface-Quellterm. Mit den Belegungen von Tabelle 3.1 erhalten wir die Massenerhaltung

$$\frac{\partial \overline{X_k \rho}}{\partial t} + \nabla \cdot \overline{X_k \rho \mathbf{v}} = \overline{\rho(\mathbf{v} - \mathbf{v}_i) \cdot \nabla X_k},$$

die Impulserhaltung

$$\frac{\partial \overline{X_k \rho \mathbf{v}}}{\partial t} + \nabla \cdot \overline{X_k \rho \mathbf{v} \mathbf{v}} = \nabla \cdot \overline{X_k \mathbf{T}} + \overline{X_k \rho \mathbf{g}} + \overline{(\rho \mathbf{v}(\mathbf{v} - \mathbf{v}_i) - \mathbf{T}) \cdot \nabla X_k}$$

und die Energieerhaltung

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \overline{X_k \rho \left(u + \frac{1}{2} v^2 \right)} + \nabla \cdot \overline{X_k \rho \left(u + \frac{1}{2} v^2 \right) \mathbf{v}} &= \nabla \cdot \overline{X_k (\mathbf{T} \cdot \mathbf{v} - \mathbf{q})} \\ &+ \overline{X_k \rho (\mathbf{g} \cdot \mathbf{v} + r)} + \overline{\left[\rho \left(u + \frac{1}{2} v^2 \right) (\mathbf{v} - \mathbf{v}_i) - (\mathbf{T} \cdot \mathbf{v} - \mathbf{q}) \right] \cdot \nabla X_k}. \end{aligned} \quad (5.2)$$

Die Entropiegleichung für Komponente k folgt, indem man statt (5.1) eine Ungleichung betrachtet. Dann ergibt sich

$$\frac{\partial \overline{X_k \rho s}}{\partial t} + \nabla \cdot \overline{X_k \rho s \mathbf{v}} + \nabla \cdot \overline{X_k \mathbf{q}} - \overline{X_k \rho \frac{r}{T}} - \overline{\left(\rho s (\mathbf{v} - \mathbf{v}_i) - \frac{\mathbf{q}}{T} \right) \cdot \nabla X_k} \geq 0.$$

Statt der Gleichung (5.2) für die totale Energie kann auch die für die innere Energie verwendet werden:

$$\frac{\partial \overline{X_k \rho u}}{\partial t} + \nabla \cdot \overline{X_k \rho u \mathbf{v}} = -\nabla \cdot \overline{X_k \mathbf{q}} + \overline{X_k \mathbf{T} : \nabla \mathbf{v}} + \overline{X_k \rho r} + \overline{(\rho u (\mathbf{v} - \mathbf{v}_i) + \mathbf{q}) \cdot \nabla X_k}.$$

5.2. Definition gemittelter Variablen

Die mikroskopische (exakte) Situation wird durch die Komponentenfunktion X_k wiedergegeben. Das Mittel von X_k ist der mittlere Anteil der ‘Vorkommnisse’ von Komponente k am Punkt \mathbf{x} zur Zeit t :

$$\alpha_k = \overline{X_k}.$$

Diese Variable wird üblicherweise ‘Volumenfraktion’ genannt. Dieser Begriff ist exakt für räumlich homogene Situationen. Genau gesagt ist α_k aber der Erwartungswert des Verhältnisses des Volumenanteils von Komponente k zum Gesamtvolumen im Grenzwert, bei dem sich dieses Volumen Null nähert. Die andere geometrische Variable ist die Interfacedichte

$$A_k = -\overline{\mathbf{n}_k \cdot \nabla X_k},$$

wobei \mathbf{n}_k der von Komponente k weg zeigende Einheitsnormalenvektor ist. Diese Variable ist wiederum der Erwartungswert des Verhältnisses von Interfacefläche zu Volumen, wo dieses Volumen gegen Null geht.

Alle restlichen Variablen werden durch gewichtete Mittel definiert. Die Haupt- oder ‘Komponenten’-Variablen sind entweder komponentengewichtet, das heißt, gewichtet mit der Komponentenfunktion X_k , oder massen-(Favre-)gewichtet, d.h. mit $X_k \rho$. Andere Variablen werden mit der Interface-Variablen ∇X_k gewichtet. Die ‘erhaltenen’ Größen sind dann die Dichte

$$\overline{\rho}_k^x := \frac{\overline{X_k \rho}}{\alpha_k},$$

die Geschwindigkeit

$$\overline{\mathbf{v}}_k^{x\rho} := \frac{\overline{X_k \rho \mathbf{v}}}{\alpha_k \overline{\rho}_k^x},$$

die innere Energie

$$\overline{u}_k^{x\rho} := \frac{\overline{X_k \rho u}}{\alpha_k \overline{\rho}_k^x},$$

und die Entropie

$$\overline{s}_k^{x\rho} := \frac{\overline{X_k \rho s}}{\alpha_k \overline{\rho}_k^x}.$$

Die Definition der Helmholtzschen freien Energie durch die innere Energie, die Temperatur und die Entropie ist

$$\psi = u - \theta s. \quad (5.3)$$

Für ensemblegemittelte Größen definieren wir die Helmholtzsche freie Energie so, daß die Relation (5.3) zwischen den gemittelten Größen dieselbe bleibt. Damit ist die gemittelte Helmholtzsche freie Energie

$$\overline{\psi}_k^{x\rho} := \frac{\overline{X_k \rho \psi}}{\alpha_k \overline{\rho}_k^x}.$$

Die Variablen, die die gemittelten Effekte der molekularen Flüsse beschreiben, sind die Spannung

$$\overline{\mathbf{T}}_k^x := \frac{\overline{X_k \mathbf{T}}}{\alpha_k},$$

der Energiefluß

$$\overline{\mathbf{q}}_k^x := \frac{\overline{X_k \mathbf{q}}}{\alpha_k}$$

und der Entropiefluß

$$\overline{\phi}_k^x := \frac{\overline{X_k (\mathbf{q}/\theta)}}{\alpha_k}.$$

Die gemittelten Volumenquellterme sind die Volumenkraft

$$\overline{\mathbf{b}}_k^{x\rho} := \frac{\overline{X_k \rho \mathbf{b}}}{\alpha_k \overline{\rho}_k^x},$$

die Energiequelle

$$\overline{T}_k^{x\rho} := \frac{\overline{X_k \rho r}}{\alpha_k \overline{\rho}_k^x}$$

und die Entropiequelle

$$\overline{\Sigma}_k^{x\rho} := \frac{\overline{X_k \rho r / \theta}}{\alpha_k \overline{\rho}_k^x}.$$

Die molekularen Flüsse zum Interface sind Interface-Quellen von Masse, Impuls, Energie oder Entropie. Diese Terme sind für Mehrkomponentenströmungen wichtig, da sie Wechselwirkungen zwischen den Materialien beschreiben. Die Interface-Impuls- bzw. Wärmequellen sind

$$\mathbf{M}_k = -\overline{\mathbf{T} \cdot \nabla X_k}, \quad E_k = \overline{\mathbf{q} \cdot \nabla X_k}.$$

Die Interface-Arbeit ist

$$W_k = -\overline{\mathbf{T} \cdot \mathbf{v} \cdot \nabla X_k}$$

und die Interface-Entropiequelle ist

$$s_k = \overline{(\mathbf{q}/\theta) \cdot \nabla X_k}.$$

Die Interface-Bewegungen verursachen Geschwindigkeiten, die i.a. nicht mit ihren Mitteln übereinstimmen (u.a. wegen Turbulenzen). Der Effekt dieser Geschwindigkeitsfluktuationen, was auch immer ihre Ursache ist, wird durch Einführung eines fluktuierenden (gestrichenen) Feldes wiedergegeben, zum Beispiel

$$\mathbf{v}'_k := \mathbf{v} - \overline{\mathbf{v}_k}^{x\rho}, \quad p'_k := p - \overline{p}_k^x.$$

Wir erhalten dann durch Umformung des Impulsstromes

$$\begin{aligned} \overline{X_k \rho \mathbf{v} \mathbf{v}} &= \overline{X_k \rho (\overline{\mathbf{v}_k}^{x\rho} + \mathbf{v}'_k) (\overline{\mathbf{v}_k}^{x\rho} + \mathbf{v}'_k)} \\ &= \overline{X_k \rho \overline{\mathbf{v}_k}^{x\rho} \overline{\mathbf{v}_k}^{x\rho}} + \overline{X_k \rho \mathbf{v}'_k \mathbf{v}'_k} = \alpha_k \overline{\rho}_k^x \overline{\mathbf{v}_k}^{x\rho} \overline{\mathbf{v}_k}^{x\rho} - \alpha_k \mathbf{T}_k^{\text{Re}}, \end{aligned}$$

wodurch die Reynolds-Spannungen

$$\mathbf{T}_k^{\text{Re}} := - \frac{\overline{X_k \rho \mathbf{v}'_k \mathbf{v}'_k}}{\alpha_k}$$

und analog der fluktuierende (Reynolds-) Energiefluß

$$\mathbf{q}_k^{\text{Re}} := \hat{\mathbf{q}}_k^{\text{Re}} + \mathbf{q}_k^{\text{T}} + \mathbf{q}_k^{\text{K}}$$

definiert sind. Die Komponenten von \mathbf{q}_k^{Re} sind der kinetische (fluktuierende) Energiefluß

$$\mathbf{q}_k^{\text{K}} := \frac{1}{\alpha_k} \overline{X_k \rho \mathbf{v}'_k \frac{1}{2} (v'_k)^2},$$

der (fluktuierende) Scherfluß

$$\mathbf{q}_k^{\text{T}} := - \frac{\overline{X_k T \cdot \nabla \mathbf{v}'_k}}{\alpha_k}$$

und der Fluß der inneren Energie

$$\hat{\mathbf{q}}_k^{\text{Re}} := \frac{\overline{X_k \rho \mathbf{v}'_k u'_k}}{\alpha_k}.$$

In der Entropiegleichung tritt der analoge Term

$$\overline{\phi}_k^{\text{Re}} := - \frac{\overline{X_k \rho S \mathbf{v}'_k}}{\alpha_k}$$

auf. In der Gleichung für die gemittelte innere Energie tritt der Dissipationsterm

$$\mathcal{D}_k = \frac{\overline{X_k \mathbf{T} : \nabla \mathbf{v}'_k}}{\alpha_k}$$

auf, der sonst keine weitere Entsprechung hat. Schließlich ist die fluktuierende (Reynolds-) kinetische Energie

$$u_k^{\text{Re}} := \frac{\overline{X_k \rho (v'_k)^2}}{2 \alpha_k \overline{\rho}_k^x}.$$

Nun gilt

$$\text{tr} \mathbf{T}_k^{\text{Re}} = -\frac{\overline{X_k \rho_k \mathbf{v}'_k \cdot \mathbf{v}'_k}}{\alpha_k} = -2u_k^{\text{Re}}.$$

Wie oben diskutiert, treten diverse Terme auf, die den Effekten der konvektiven und molekularen Flüsse am Interface entsprechen. Die konvektiven Flußterme sind die Interfacequellen der Masse, des Impulses, der inneren Energie, der kinetischen Energie und der Entropie:

$$\begin{aligned} \Gamma_k &= \overline{\rho(\mathbf{v} - \mathbf{v}_i) \cdot \nabla X_k}, & \mathbf{v}_{ki}^m \Gamma_k &= \overline{\rho \mathbf{v}(\mathbf{v} - \mathbf{v}_i) \cdot \nabla X_k}, & \bar{u}_{ki} \Gamma_k &= \overline{\rho u(\mathbf{v} - \mathbf{v}_i) \cdot \nabla X_k}, \\ \frac{1}{2}(\bar{v}_{ki}^e)^2 \Gamma_k &= \frac{1}{2} \overline{\rho (v_k)^2 (\mathbf{v} - \mathbf{v}_i) \cdot \nabla X_k}, & s_{ki} \Gamma_k &= \overline{\rho s(\mathbf{v} - \mathbf{v}_i) \cdot \nabla X_k}. \end{aligned}$$

5.3. Gemittelte Bilanzgleichungen

In diesen Variablen lauten die Bilanzgleichungen für die Masse, den Impuls und die Energie (bzw. innere Energie) sowie die Entropiegleichung:

$$\frac{\partial(\alpha_k \bar{\rho}_k^x)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \bar{\rho}_k^x \bar{\mathbf{v}}_k^{x\rho}) = \Gamma_k, \quad (5.4)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\alpha_k \bar{\rho}_k^x \bar{\mathbf{v}}_k^{x\rho})}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \bar{\rho}_k^x \bar{\mathbf{v}}_k^{x\rho} \bar{\mathbf{v}}_k^{x\rho}) \\ = \nabla \cdot (\alpha_k (\bar{\mathbf{T}}_k^x + \mathbf{T}_k^{\text{Re}})) + \alpha_k \bar{\rho}_k^x \bar{\mathbf{b}}_k^{x\rho} + \mathbf{M}_k + \mathbf{v}_{ki}^m \Gamma_k, \end{aligned} \quad (5.5)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left[\alpha_k \bar{\rho}_k^x \left(\bar{u}_k^{x\rho} + \frac{1}{2} (\bar{\mathbf{v}}_k^{x\rho})^2 + u_k^{\text{Re}} \right) \right] + \nabla \cdot \left[\alpha_k \bar{\rho}_k^x \bar{\mathbf{v}}_k^{x\rho} \left(\bar{u}_k^{x\rho} + \frac{1}{2} (\bar{\mathbf{v}}_k^{x\rho})^2 + u_k^{\text{Re}} \right) \right] \\ = \nabla \cdot \left(\alpha_k \left((\bar{\mathbf{T}}_k^x + \mathbf{T}_k^{\text{Re}}) \cdot \bar{\mathbf{v}}_k^{x\rho} - \bar{\mathbf{q}}_k^x - \mathbf{q}_k^{\text{Re}} \right) \right) + \alpha_k \bar{\rho}_k^x (\bar{r}_k^{x\rho} + \bar{\mathbf{b}}_k^{x\rho} \cdot \bar{\mathbf{v}}_k^{x\rho}) \\ + E_k + W_k + \left(u_{ki} + \frac{1}{2} (v_{ki}^e)^2 \right) \Gamma_k, \end{aligned} \quad (5.6)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\alpha_k \bar{\rho}_k^x \bar{u}_k^{x\rho})}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \bar{\rho}_k^x \bar{\mathbf{v}}_k^{x\rho} \bar{u}_k^{x\rho}) \\ = \alpha_k \bar{\mathbf{T}}_k^x : \nabla \bar{\mathbf{v}}_k^{x\rho} - \nabla \cdot (\alpha_k (\bar{\mathbf{q}}_k^x + \hat{\mathbf{q}}_k^{\text{Re}})) + \alpha_k \bar{\rho}_k^x \bar{r}_k^{x\rho} + E_k + u_{ki} \Gamma_k + \alpha_k \mathcal{D}_k, \end{aligned} \quad (5.7)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\alpha_k \bar{\rho}_k^x \bar{s}_k^{x\rho})}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \bar{\rho}_k^x \bar{\mathbf{v}}_k^{x\rho} \bar{s}_k^{x\rho}) \\ \geq \nabla \cdot (\alpha_k (\bar{\phi}_k^x + \phi_k^{\text{Re}})) + \alpha_k \bar{\rho}_k^x \bar{\Sigma}_k^{x\rho} + S_k + s_{ki} \Gamma_k. \end{aligned} \quad (5.8)$$

5.3.1. Sprungbedingungen. In Analogie zur Theorie der Lösungen [7, Ch. 5] wird die Masse, im Gegensatz dazu aber nicht der Impuls und die Energie erhalten. Der Hauptunterschied zur Theorie der Lösungen besteht im Auftreten eines *Interfaces*, das Komponenten voneinander *trennt*. Dieses Interface kann einen Beitrag zu den Impuls- und Energiebilanzen liefern. Die Sprungbedingungen erhält man formal dadurch, daß man die Bilanzgleichungen

mit $\mathbf{n}_k \cdot \nabla X_k$ multipliziert und dann mittelt. Hieraus ergeben sich folgende Sprungbedingungen für Masse, Impuls, Energie und Entropie, wobei wir verschiedene Komponenten mit den Indizes “1” und “2” bezeichnen und \mathbf{m} die Oberflächenspannungsquelle und \mathcal{E} die Interface-Energiequelle ist:

$$\Gamma_1 + \Gamma_2 = 0, \quad (5.9)$$

$$\mathbf{M}_1 + \mathbf{M}_2 + \mathbf{v}_{1i}^m \Gamma_1 + \mathbf{v}_{2i}^m \Gamma_2 = \mathbf{m}, \quad (5.10)$$

$$E_1 + W_1 + E_2 + W_2 + \left(u_{1i} + \frac{1}{2}(v_{1i}^e)^2\right) \Gamma_1 + \left(u_{2i} + \frac{1}{2}(v_{2i}^e)^2\right) \Gamma_2 = \mathcal{E}, \quad (5.11)$$

$$S_1 + S_2 + s_{1i} \Gamma_1 + s_{2i} \Gamma_2 \geq 0. \quad (5.12)$$

5.3.2. Umformungen. Wir geben noch einige Beziehungen für die Interface-Transferterme an und leiten die Langrangeschen Formen der Bilanzgleichungen her. Es folgt auch eine Bilanzgleichung für die fluktuierende kinetische Energie.

Im allgemeinen möchte man eine Spannung als Druck plus Scherspannung in der Form $\mathbf{T} = -p\mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}$ schreiben. Die mittlere Spannung kann dann in der Form

$$\overline{\mathbf{T}}_k^x = -\overline{p}_k^x \mathbf{I} + \overline{\boldsymbol{\tau}}_k^x$$

dargestellt werden. Der gemittelte Interface-Druck p_{ki} und die Scherspannung $\boldsymbol{\tau}_{ki}$ werden eingeführt, um Effekte der globalen mittleren Felder von lokalen Effekten der Interface-Kraft zu trennen. Der Interface-Druck und die entsprechende Scherspannung sind gegeben durch

$$p_{ki} = \frac{\overline{p\mathbf{n}_k \cdot \nabla X_k}}{a_i}, \quad \boldsymbol{\tau}_{ki} = \frac{\overline{\boldsymbol{\tau}_k \mathbf{n}_k \cdot \nabla X_k}}{a_i}.$$

Dann kann die Interface-Kraftdichte geschrieben werden als

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_k &= -\overline{\mathbf{T} \cdot \nabla X_k} = \overline{p \nabla X_k} - \overline{\boldsymbol{\tau} \cdot \nabla X_k} \\ &= p_{ki} \overline{\nabla X_k} - \boldsymbol{\tau}_{ki} \cdot \overline{\nabla X_k} - \overline{\mathbf{T}'_{ki} \cdot \nabla X_k} = p_{ki} \nabla \alpha_k - \boldsymbol{\tau}_{ki} \nabla \alpha_k + \mathbf{M}'_k \end{aligned}$$

mit der Extra-Interface-Impulsquelle

$$\mathbf{M}'_k := \mathbf{M}_k + p_{ki} \nabla \alpha_k - \boldsymbol{\tau}_{ki} \cdot \nabla \alpha_k$$

und

$$\mathbf{T}'_{ki} := -p'_{ki} \mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}'_{ki} = -(p - p_{ki}) \mathbf{I} + (\boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau}_{ki}).$$

Die Interface-Arbeitsterme (“working” [7]) werden ähnlich umgeschrieben als

$$W_k = -\overline{\mathbf{T} \cdot \mathbf{v} \cdot \nabla X_k} = -\overline{\mathbf{T} \cdot \overline{\mathbf{v}}_k^{x\rho} \cdot \nabla X_k} - \overline{\mathbf{T} \cdot \mathbf{v}'_k \cdot \nabla X_k} = W'_k + \mathbf{M}_k \cdot \overline{\mathbf{v}}_k^{x\rho},$$

wobei der Extra-Interface-Arbeitsterm

$$W'_k = -\overline{\mathbf{T} \cdot \mathbf{v}'_k \cdot \nabla X_k}$$

auftritt. Schließlich teilen wir \mathcal{D}_k , den Quellterm der inneren Energie, wie folgt in den inneren Dissipationsterm D_k und den Druckterm P_k auf:

$$D_k = \frac{\overline{X_k \boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{v}'_k}}{\alpha_k}, \quad P_k = \frac{\overline{X_k p \nabla \cdot \mathbf{v}'_k}}{\alpha_k}.$$

5.3.3. Lagrangesche Formen. Die Massenerhaltungsgleichung für Komponente k kann in der Impulserhaltungsgleichung verwendet werden, um folgende Form der Impulserhaltungsgleichung herzuleiten:

$$\begin{aligned} \alpha_k \overline{\rho_k^x} \frac{D_k \overline{\mathbf{v}_k^{x\rho}}}{Dt} &= \alpha_k \overline{\rho_k^x} \left(\frac{\partial \overline{\mathbf{v}_k^{x\rho}}}{\partial t} + \overline{\mathbf{v}_k^{x\rho}} \cdot \nabla \overline{\mathbf{v}_k^{x\rho}} \right) \\ &= \nabla \cdot \left(\alpha_k (\overline{\mathbf{T}_k^x} + \mathbf{T}_k^{\text{Re}}) + \alpha_k \overline{\rho_k^x} \overline{\mathbf{b}_k^{x\rho}} + \mathbf{M}_k + (\mathbf{v}_{ki}^m - \overline{\mathbf{v}_k^{x\rho}}) \Gamma_k \right), \end{aligned}$$

wobei der Operator D_k/Dt definiert ist durch

$$\frac{D_k(\cdot)}{Dt} := \frac{\partial(\cdot)}{\partial t} + \overline{\mathbf{v}_k^{x\rho}} \cdot \nabla(\cdot).$$

Ähnlich erhalten wir durch Anwendung der Massenbilanz auf die Energieerhaltungsgleichung

$$\begin{aligned} \alpha_k \overline{\rho_k^x} \frac{D_k}{Dt} \left(\overline{u_k^{x\rho}} + \frac{1}{2} (\overline{v_k^{x\rho}})^2 + u_k^{\text{Re}} \right) &= \alpha_k \overline{\rho_k^x} \left[\frac{\partial}{\partial t} \left(\overline{u_k^{x\rho}} + \frac{1}{2} (\overline{v_k^{x\rho}})^2 + u_k^{\text{Re}} \right) + \overline{\mathbf{v}_k^{x\rho}} \cdot \nabla \left(\overline{u_k^{x\rho}} + \frac{1}{2} (\overline{v_k^{x\rho}})^2 + u_k^{\text{Re}} \right) \right] \\ &= \nabla \cdot \left(\alpha_k \left((\overline{\mathbf{T}_k^x} + \mathbf{T}_k^{\text{Re}}) \cdot \overline{\mathbf{v}_k^{x\rho}} - \overline{\mathbf{q}_k^x} - \mathbf{q}_k^{\text{Re}} \right) + \alpha_k \overline{\rho_k^x} (\overline{r_k^{x\rho}} + \overline{\mathbf{b}_k^{x\rho}} \cdot \overline{\mathbf{v}_k^{x\rho}}) \right) \\ &\quad + E_k + W_k + \left[u_{ki} - \overline{u_k^{x\rho}} - u_k^{\text{Re}} + \frac{1}{2} ((v_{ki}^e)^2 - (\overline{v_k^{x\rho}})^2) \right] \Gamma_k. \end{aligned}$$

Dies sind die materiellen oder Lagrangeschen Formen der Impuls- bzw. der Energiegleichung. In einigen Arbeiten werden diese Gleichungen zur Beschreibung der dispersen Komponente verwendet.

5.3.4. Bilanzgleichung der fluktuierenden kinetischen Energie. Mit Hilfe der Impulsgleichung, der Identität

$$\frac{D_k}{Dt} \left(\frac{1}{2} (\overline{v_k^{x\rho}})^2 \right) = \overline{\mathbf{v}_k^{x\rho}} \cdot \frac{D_k \overline{\mathbf{v}_k^{x\rho}}}{Dt}$$

und der Gleichung für die innere Energie kann die folgende Gleichung hergeleitet werden [7, p. 130]:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial(\alpha_k \overline{\rho_k^x} u_k^{\text{Re}})}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \overline{\rho_k^x} u_k^{\text{Re}} \overline{\mathbf{v}_k^{x\rho}}) &= \alpha_k \mathbf{T}_k^{\text{Re}} : \nabla \overline{\mathbf{v}^{x\rho}} - \nabla \cdot (\alpha_k (\mathbf{q}_k^{\text{K}} + \mathbf{q}_k^{\text{T}})) \\
&+ \frac{1}{2} \left[(v_{ki}^e)^2 + (\overline{v_k^{x\rho}})^2 - \overline{\mathbf{v}_k^{x\rho}} \cdot \mathbf{v}_{ki}^m \right] \Gamma_k \\
&+ W'_k + \alpha_k D_k - \alpha_k P_k.
\end{aligned} \tag{5.13}$$

Diese Gleichung ist von besonderem Interesse bei Mehrkomponentenströmungen, da sie die Struktur von Theorien mit einer Entropie oder “Unordnung” auf der Skala molekularer Schwingungen und einer separaten unabhängigen Entropie oder “Unordnung” auf der Skala der Bewegungsfuktuationen der Komponenten motiviert.

Modellierung von Mehrkomponentenströmungen

Wir behandeln nun verschiedene Zugänge zur Bestimmung konstitutiver Gleichungen. Hierzu gehören allgemeine Invarianz-Axiome und die Verwendung von Entropiegleichungen, um Einschränkungen für die Terme in den konstitutiven Gleichungen zu erzeugen.

6.1. Vollständigkeit der Formulierung

Wir betrachten das dreidimensionale, instationäre Zweiphasen-Strömungsmodell, das durch die Gleichungen (2.3), (2.4) und (2.7) (oder, äquivalent hierzu, durch die Gleichungen (5.4), (5.5) und (5.6)) gegeben ist. Diese Gleichungen müssen durch Zustandsgleichungen, konstitutive Gleichungen, Anfangs- und Randbedingungen vervollständigt werden. Das System muß bestimmt sein. *Konstitutive Gleichungen* legen fest, wie sich die Komponenten verhalten und miteinander wechselwirken, während *Zustandsgleichungen* den thermodynamischen Zustand des Materials festlegen. Der wesentliche neue Aspekt bei Mehrkomponentenströmungen besteht in der Notwendigkeit, die Komponenten-Wechselwirkungsterme (\mathbf{M}_k , E_k^m und E_k^M), die Phasenübergangsterme (Γ_k , \mathbf{v}_{ki}^m , v_{ki}^e und u_{ki}^m) sowie die Terme \mathbf{T}_k^m , \mathbf{q}_k^m , \mathbf{T}_k^M und \mathbf{q}_k^M durch die Zustandsvariablen α_k , \mathbf{v}_k etc. festzulegen.

6.2. Konstitutive Gleichungen

Der erste Schritt in der Vervollständigung der Formulierung besteht in der Festlegung einer Menge abhängiger Variablen und einer Menge unabhängiger Variablen, deren Werte jene bestimmen. Liegt diese funktionale Abhängigkeit einmal fest, so müssen die Funktionen gefunden werden, die das Materialverhalten beschreiben. Hierbei werden häufig allgemeine Prinzipien postuliert.

6.2.1. Allgemeine Prinzipien. Die im folgenden skizzierten Prinzipien können als allgemeiner Leitfaden für die Modellierung von Mehrphasenströmungen verstanden werden.

Korrekte Gestelltheit (“*well-posedness*”). Die Beschreibung der Bewegung sollte so sein, daß eine Lösung des Anfangs-Randwertproblems existiert, eindeutig ist, und stetig von den Anfangs- und Randbedingungen abhängt.

Das Prinzip der *Äquipräsenz* besagt, daß alle Variablen in jeder konstitutiven Gleichung vorkommen müssen, falls dies nicht durch ein anderes Prinzip ausgeschlossen wird. Dies ist für Mehrkomponenten-Materialien sicher nicht angemessen, sodaß wir vielmehr das Prinzip der *Komponententrennung* anwenden: eine Variable, die eine Wechselwirkung einer Komponente mit sich selbst beschreibt, kann nur von den Variablen dieser Komponente abhängen.

Das Prinzip der *Beobachterunabhängigkeit* besagt schließlich, daß die funktionale Abhängigkeit einer konstitutiv beschriebenen Variablen von denjenigen, die den mechanischen Zustand beschreiben, beobachterunabhängig sein muß. Dieses Prinzip hat wesentlichen (und gelegentlich unerwarteten) Nutzen bei Mehrkomponentenströmungen.

6.2.2. Beobachterunabhängigkeit. Seien \mathbf{x} und \mathbf{x}' verschiedene Darstellungen desselben Vektors in zwei Bezugssystemen. Dann gilt

$$\mathbf{x}' = \mathbf{Q}\mathbf{x} + \mathbf{b}, \quad (6.1)$$

wobei $\mathbf{Q} = \mathbf{Q}(t)$ eine orthonormale Transformation und \mathbf{b} eine Translation ist. Wir erinnern daran, daß ein Skalar s , ein Vektor \mathbf{v} bzw. ein Tensor 2. Stufe \mathbf{T} *objektiv* heißt, falls $s' = s$, $\mathbf{v}' = \mathbf{Q}\mathbf{v}$ bzw. $\mathbf{T}' = \mathbf{Q}\mathbf{T}\mathbf{Q}^T$ gilt. Wir wissen ferner, daß eine Geschwindigkeit keine objektive Größe ist, denn differenzieren wir (6.1), Material k verfolgend, so folgt

$$\mathbf{v}'_k = \mathbf{Q}\mathbf{v}_k + (\dot{\mathbf{Q}}\mathbf{x} + \dot{\mathbf{b}}).$$

Differenzieren wir (6.1) für zwei Materialien k und l und subtrahieren die Ergebnisse, dann gilt

$$\mathbf{v}'_k - \mathbf{v}'_l = \mathbf{Q}(\mathbf{v}_k - \mathbf{v}_l),$$

das heißt, die Geschwindigkeitsdifferenzen $\mathbf{v}_{kl} := \mathbf{v}_k - \mathbf{v}_l$ sind objektiv.

Bei Mehrkomponentenströmungen können die Wechselwirkungen u.U. von den Beschleunigungen abhängen. Beschleunigungen sind zwar nicht objektiv, es gilt aber

$$\frac{D_l \mathbf{v}'_k}{Dt} = \mathbf{Q} \frac{D_l \mathbf{v}_k}{Dt} + \dot{\mathbf{Q}}(\mathbf{v}_k + \mathbf{v}_l) + \ddot{\mathbf{Q}}\mathbf{x} + \ddot{\mathbf{b}} \quad (6.2)$$

und somit

$$\frac{D_l \mathbf{v}'_k}{Dt} - \frac{D_k \mathbf{v}'_l}{Dt} = \mathbf{Q} \left(\frac{D_l \mathbf{v}_k}{Dt} - \frac{D_k \mathbf{v}_l}{Dt} \right),$$

d.h. entgegengesetzte Beschleunigungsdifferenzen sind objektiv.

Genau wie in der klassischen Kontinuumsmechanik folgt mit

$$\nabla' \mathbf{v}'_k = \mathbf{Q} \cdot (\nabla \mathbf{v}_k) \cdot \mathbf{Q} \cdot \mathbf{Q}^T, \quad (6.3)$$

daß

$$\mathbf{D}_k = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{v}_k + (\nabla \mathbf{v}_k)^T)$$

objektiv ist, jedoch nicht der Sprintensor

$$\mathbf{W}_k = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{v}_k - (\nabla \mathbf{v}_k)^T),$$

denn es gilt

$$\mathbf{W}'_k = \mathbf{Q}\mathbf{W}_k^T\mathbf{Q}^T + \frac{1}{2}(\dot{\mathbf{Q}}\mathbf{Q}^T - (\dot{\mathbf{Q}}\mathbf{Q}^T)^T) = \mathbf{Q}\mathbf{W}_k^T\mathbf{Q}^T + \frac{1}{2}(\dot{\mathbf{Q}}\mathbf{Q}^T - \mathbf{Q}\dot{\mathbf{Q}}^T).$$

Der beobachtete Spintensor hängt vom relativen Spin der beiden Bezugssysteme ab. Bei Mehrkomponentenmaterialien gibt es interessanterweise objektive Tensoren, die keine Entsprechung bei Einkomponentenmaterialien besitzen. Summieren wir etwa (6.3) für verschiedene Komponenten k und l , so folgt

$$\nabla \mathbf{v}'_k + (\nabla \mathbf{v}'_l)^T = \mathbf{Q} \cdot (\nabla \mathbf{v}_k + (\nabla \mathbf{v}_l)^T) \cdot \mathbf{Q}^T, \quad (6.4)$$

wobei wir $\mathbf{Q}\mathbf{Q}^T = \mathbf{I}$ verwendet haben, um

$$\dot{\mathbf{Q}}\mathbf{Q}^T + \mathbf{Q}\dot{\mathbf{Q}}^T = 0$$

herzuleiten. Somit ist der gemischte Verzerrungstensor

$$\mathbf{D}_{kl} := \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{v}_k + (\nabla \mathbf{v}_l)^T)$$

für beliebige k und l objektiv. Wegen (6.4) gilt dies aber auch für den relativen Rotationstensor $\mathbf{W}_{kl} := \mathbf{W}_k - \mathbf{W}_l$. Ferner gilt

$$\begin{aligned} & \frac{D_k \mathbf{v}'_k}{Dt} - \frac{D_l \mathbf{v}'_l}{Dt} - 2\mathbf{W}'_m(\mathbf{v}'_k - \mathbf{v}'_l) \\ &= \mathbf{Q} \cdot \left(\frac{D_k \mathbf{v}_k}{Dt} - \frac{D_l \mathbf{v}_l}{Dt} \right) + 2\dot{\mathbf{Q}}(\mathbf{v}_k - \mathbf{v}_l) - 2\mathbf{Q}\mathbf{W}_m\mathbf{Q}^T(\mathbf{v}_k - \mathbf{v}_l) - 2\dot{\mathbf{Q}}\mathbf{Q}^T\mathbf{Q}(\mathbf{v}_k - \mathbf{v}_l) \\ &= \mathbf{Q} \cdot \left(\frac{D_k \mathbf{v}_k}{Dt} - \frac{D_l \mathbf{v}_l}{Dt} - 2\mathbf{W}_m(\mathbf{v}_k - \mathbf{v}_l) \right). \end{aligned}$$

Damit ist die Größe

$$\mathbf{a}_{lk} := \frac{D_k \mathbf{v}_k}{Dt} - \frac{D_l \mathbf{v}_l}{Dt} - 2\mathbf{W}_m(\mathbf{v}_k - \mathbf{v}_l)$$

für beliebige Wahlen von k , l und m objektiv. Da wir bereits wissen, daß \mathbf{W}_{kl} objektiv ist, sehen wir, daß \mathbf{a}_{lk} , eine Größe mit der Dimension einer Beschleunigung, ebenfalls objektiv ist.

6.2.3. Darstellungssätze. Manchmal impliziert allein das Prinzip der Beobachterunabhängigkeit, daß eine beobachterunabhängige Funktion einer objektiven Variable isotrop ist. Das gilt zum Beispiel für vektorwertige Funktionen von Vektoren. Häufiger jedoch, wenn das beschriebene Material isotrop und die konstitutiven Funktionen beobachterunabhängig sind, muß die Isotropie der Funktion explizit gefordert werden. Die komplizierten Funktionen für die Interface-Wechselwirkungsterme und die gemittelten Mikroskalen- und Reynolds-Flüsse haben meistens diese Eigenschaft. Isotrope Funktionen sind nicht willkürlich, sondern sind durch Darstellungssätze gegeben. Ist etwa \mathbf{m} eine beobachterunabhängige vektorwertige Funktion der objektiven Vektoren $\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n$ und der Tensoren $\mathbf{T}_1, \dots, \mathbf{T}_m$, dann folgt

$$\mathbf{m} = \sum_{i=1}^n A_i \mathbf{v}_i + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m (B_{ij} \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{T}_j + C_{ij} \mathbf{T}_j \cdot \mathbf{v}_i);$$

ist \mathbf{R} eine beobachterunabhängige tensorwertige Funktion derselben objektiven Größen, dann gilt

$$\begin{aligned} \mathbf{R} = & \sum_{i=1}^m D_i \mathbf{T}_i + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m E_{ij} \mathbf{v}_i \mathbf{v}_j + \sum_{i,j=1}^n \sum_{k,l=1}^m (F_{ijkl} \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{T}_k \mathbf{v}_j \cdot \mathbf{T}_l + G_{ijkl} \mathbf{T}_k \cdot \mathbf{v}_i \mathbf{v}_j \cdot \mathbf{T}_l \\ & + H_{ijkl} \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{T}_k \mathbf{T}_l \cdot \mathbf{v}_j + I_{ijkl} \mathbf{T}_k \cdot \mathbf{v}_i \mathbf{T}_l \cdot \mathbf{v}_j), \end{aligned}$$

wobei die skalarwertigen Koeffizientenfunktionen von den unabhängigen gemeinsamen Invarianten aller Vektoren und Tensoren abhängen.

6.3. Formen der konstitutiven Gleichungen

Wir betrachten eine allgemeine Zweiphasenströmung ohne Energieeffekte. Die Spannung in einer Mehrkomponentenmischung ist die Kraft pro Flächeneinheit der Komponente k über ein Element mit der Normalen \mathbf{n} . Hier “fließen” beide Materialien, d.h. wir nehmen Flüssigkeits-Modelle an, aber die Partikelspannung beruht auf einem anderen Mechanismus als die Fluidspannung. Der Mikroskalen-Spannungsterm wird als “Druck plus Extra-Spannung” angesetzt:

$$\mathbf{T}_k^m = -p_k^m \mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}_k^m,$$

und analog für die Mesoskalen-Spannung:

$$\mathbf{T}_k^M = -p_k^M \mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}_k^M.$$

Der Interface-Term \mathbf{M}_k ist für die Beschreibung von Mehrkomponenten-Strömungen wesentlich und macht überhaupt den Unterschied zur gewöhnlichen Kontinuumsmechanik aus. Wir führen die Interface-Geschwindigkeit \mathbf{v}_i als Variable für die Beschreibung der Komponente k ein.

Die Interface-Kraftdichte hängt von den Vektoren $\mathbf{v}_{ki} := \mathbf{v}_k - \mathbf{v}_i$,

$$\mathbf{a}_{ki} := \left(\frac{\partial \mathbf{v}_k}{\partial t} + \mathbf{v}_i \cdot \nabla \mathbf{v}_k \right) - \left(\frac{\partial \mathbf{v}_i}{\partial t} + \mathbf{v}_k \cdot \nabla \mathbf{v}_i \right),$$

$\nabla \alpha_k$, und den Tensoren $\nabla \mathbf{v}_k$, $\nabla \mathbf{v}_i$ und $\nabla \nabla \alpha_k$ ab. Dann folgt

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_k = & A_{k1} \mathbf{v}_{ki} + A_{k2} \nabla \alpha_k + A_{k3} \mathbf{a}_{ki} + B_{k11} \mathbf{v}_{ki} \cdot \mathbf{D}_k + B_{k12} \mathbf{v}_{ki} \cdot \mathbf{D}_i + B_{k13} \mathbf{v}_{ki} \mathbf{W}_{ki} \\ & + B_{k14} \mathbf{v}_{ki} \cdot \nabla \nabla \alpha_k + B_{k12} \nabla \alpha_k \cdot \mathbf{D}_k + B_{k22} \nabla \alpha_k \cdot \mathbf{D}_i + B_{k23} \nabla \alpha_k \cdot \mathbf{W}_{ki} \\ & + B_{k24} \nabla \alpha_k \cdot \nabla \nabla \alpha_k + B_{k31} \mathbf{a}_{ki} \cdot \mathbf{D}_k + B_{k32} \mathbf{a}_{ki} \cdot \mathbf{D}_i + B_{k33} \mathbf{a}_{ki} \cdot \mathbf{W}_{ki} \\ & + B_{k34} \nabla \nabla \alpha_k. \end{aligned} \tag{6.5}$$

Die Drücke werden durch eine Zustandsgleichung festgelegt. Im Moment brauchen wir Mikro- und Mesoskalen-Extra-Spannungsterme an dieser Stelle nicht zu trennen, d.h. wir setzen

$$\boldsymbol{\tau} := \boldsymbol{\tau}_k^m + \boldsymbol{\tau}_k^M$$

und haben

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\tau}_k = & \mu_{kk} \mathbf{D}_k + \mu_{ki} \mathbf{D}_i + \mu_{kg} \nabla \nabla \alpha_k + E_{k11} \mathbf{v}_{ki} \mathbf{v}_{ki} + E_{k22} \nabla \alpha_k \nabla \alpha_k + E_{k33} \mathbf{a}_{ki} \mathbf{a}_{ki} \\ & + E_{k12} (\mathbf{v}_{ki} \nabla \alpha_k + \nabla \alpha_k \mathbf{v}_{ki}) + E_{k13} (\mathbf{v}_{ki} \mathbf{a}_{ki} + \mathbf{a}_{ki} \mathbf{v}_{ki}) + E_{k23} (\nabla \alpha_k \mathbf{a}_{ki} + \mathbf{a}_{ki} \nabla \alpha_k) \quad (6.6) \\ & + 81 \text{ Terme der Form } \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{T}_k \mathbf{v}_l \cdot \mathbf{T}_m. \end{aligned}$$

Die skalaren Koeffizienten in diesen Darstellungen können Funktionen jeder objektiven skalaren Variablen sein, einschließlich der skalaren Invarianten von Vektor- und Tensorgrößen.

Wir schränken die Theorie nun auf diejenigen Terme ein, die nicht mehr als eine Raum- oder Zeitableitung enthalten. Diese "Theorie ersten Grades" bedeutet

$$B_{14} = B_{2j} = B_{3j} = 0, \quad \mu_{k3} = 0, \quad E_{k22} = E_{k33} = 0, \quad 81 \text{ Terme} = 0.$$

Damit reduziert sich die approximative Theorie auf

$$\mathbf{M}_k = A_{k1} \mathbf{v}_{ki} + A_{k2} \nabla \alpha_k + A_{k3} \mathbf{a}_{ki} + B_{k11} \mathbf{v}_{ki} \cdot \mathbf{D}_k + B_{k12} \mathbf{v}_{ki} \mathbf{D}_i + B_{k13} \mathbf{v}_{ki} \cdot \mathbf{W}_{ki}, \quad (6.7)$$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\tau}_k = & \mu_{kk} \mathbf{D}_k + \mu_{ki} \mathbf{D}_i + E_{k11} \mathbf{v}_{ki} \mathbf{v}_{ki} \\ & + E_{k12} (\mathbf{v}_{ki} \nabla \alpha_k + \nabla \alpha_k \mathbf{v}_{ki}) + E_{k13} (\mathbf{v}_{ki} \mathbf{a}_{ki} + \mathbf{a}_{ki} \mathbf{v}_{ki}). \end{aligned} \quad (6.8)$$

Die Koeffizienten in (6.7) und (6.8) können Funktionen von α_k und $|\mathbf{v}_{ki}|$ sein. Zusätzlich können die Koeffizienten A_{k1} und E_{k11} lineare Funktionen von

$$\text{tr } \mathbf{D}_l = \nabla \cdot \mathbf{v}_l, \quad \mathbf{v}_{ki} \cdot \nabla \alpha_k, \quad \frac{\partial \alpha_k}{\partial t}, \quad \mathbf{v}_{ki} \cdot \mathbf{a}_{ki}, \quad \mathbf{v}_{ki} \cdot \mathbf{D}_l \cdot \mathbf{v}_{ki}, \quad |\mathbf{a}_{ki}|$$

sein, wobei gilt:

$$\mathbf{v}_{ki} \cdot \mathbf{a}_{ki} = \frac{D_k}{Dt} \left(\frac{|\mathbf{v}_{ki}|^2}{2} \right) + \mathbf{v}_{ki} \cdot \mathbf{D}_i \cdot \mathbf{v}_{ki}.$$

Wir schreiben

$$\begin{aligned} A_{k1} = & A_{k10} + A_{k11} \nabla \cdot \mathbf{v}_k + A_{k12} \nabla \cdot \mathbf{v}_i + A_{k13} \mathbf{v}_{ki} \cdot \nabla \alpha_k + A_{k14} \left(\frac{D_k \alpha_k}{Dt} \right) \\ & + A_{k15} \left(\frac{D_k |\mathbf{v}_{ki}|^2}{Dt} \right) + A_{k16} \mathbf{v}_{ki} \cdot \mathbf{D}_k \cdot \mathbf{v}_{ki} + A_{k17} \mathbf{v}_{ki} \cdot \mathbf{D}_i \cdot \mathbf{v}_{ki} + A_{k18} |\mathbf{v}_{ki}|, \end{aligned} \quad (6.9)$$

$$\begin{aligned} E_{k11} = & E_{k110} + E_{k111} \nabla \cdot \mathbf{v}_k + E_{k112} \nabla \cdot \mathbf{v}_i + E_{k113} \mathbf{v}_{ki} \cdot \nabla \alpha_k + E_{k114} \left(\frac{D_k \alpha_k}{Dt} \right) \\ & + E_{k115} \left(\frac{D_k |\mathbf{v}_{ki}|^2}{Dt} \right) + E_{k116} \mathbf{v}_{ki} \cdot \mathbf{D}_k \cdot \mathbf{v}_{ki} + E_{k117} \mathbf{v}_{ki} \cdot \mathbf{D}_i \cdot \mathbf{v}_{ki} + E_{k118} |\mathbf{v}_{ki}| \end{aligned} \quad (6.10)$$

Die approximative Theorie kann somit durch die Ermittlung 37 skalarer Funktionen von α_k und $|\mathbf{v}_{ki}|$ festgelegt werden.

Viele Strömungen sind hinreichend langsam, so daß Trägheitskräfte unwichtig sind. Dann behalten wir nur diejenigen Terme, welche linear in den Geschwindigkeiten sind. Die Gleichungen reduzieren sich dann auf

$$\mathbf{M}_k = A_{k1} \mathbf{v}_{ki} + A_{k2} \nabla \alpha_k, \quad (6.11)$$

$$\boldsymbol{\tau}_k = \mu_{k1} \mathbf{D}_k + \mu_{k2} \mathbf{D}_i + E_{k12} (\mathbf{v}_{ki} \nabla \alpha_k + \nabla \alpha_k \mathbf{v}_{ki}). \quad (6.12)$$

Die bisherige Formulierung ist sehr allgemein dahingehend, daß die Beschreibung für die Komponente k von den Zustandsvariablen dieser Komponente und dem Komponente k berührenden "Interface" abhängt. Normalerweise betrachtet man bei einer Zweiphasenströmung eine 'disperse' in einer 'kontinuierlichen' Komponente, einem Fluid. In dieser Situation ist die Bewegung des Interfaces eng verknüpft mit der der dispersen Komponente. Die Ausdrücke für \mathbf{M}_C und $\boldsymbol{\tau}_C$ können dann wie folgt dargestellt werden:

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_C = & A_{C1}\mathbf{v}_{CD} - A_{C2}\nabla\alpha_D + A_{C3}\mathbf{a}_{CD} + B_{C11}\mathbf{v}_{CD} \cdot \mathbf{D}_C + B_{C12}\mathbf{v}_{CD} \cdot \mathbf{D}_D \\ & + B_{C13}\mathbf{v}_{CD} \cdot \mathbf{W}_{CD}, \end{aligned} \quad (6.13)$$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\tau}_C = & \mu_{CC}\mathbf{D}_k + \mu_{CD}\mathbf{D}_D + E_{CD1}\mathbf{v}_{CD}\mathbf{v}_{CD} + E_{CD2}(\mathbf{v}_{CD} + \nabla\alpha_D + \nabla\alpha_D\mathbf{v}_{CD}) \\ & + E_{CD3}(\mathbf{v}_{CD}\mathbf{a}_{CD} + \mathbf{a}_{CD}\mathbf{v}_{CD}). \end{aligned} \quad (6.14)$$

6.4. Entropierestriktionen

Die Entropieungleichungen aus Abschnitt 2.4 können verwendet werden, um Restriktionen für die konstitutiven Gleichungen zu gewinnen. Hierbei werden einige Annahmen über die Abhängigkeit von Mikroskalen-Variablen, wie der inneren Energie, von den Feldern getroffen. Hieraus erhält man eine Struktur mit reichhaltigen Einschränkungen der konstitutiven Gleichungen, die aber immer noch allgemein genug ist, um interessante Modelle zuzulassen. Der Vorteil des Mehrskalenzuganges bei der inneren Energie besteht darin, daß es leichter ist, die physikalisch sinnvollen Annahmen genau zu benennen.

6.4.1. Mikroskalen-Betrachtungen. Die speziellen Eigenschaften von Mehrkomponenten-Materialien gehen nicht nur in die Modelle für ihre Kinematik, sondern auch in die konstitutiven Modelle ein. Derartige Materialien sind keine klassischen Mischungen, bei denen die Konstituenten auf molekularer Ebene miteinander vermischt sind. Vielmehr bestehen sie aus verschiedenen Körpern, von denen jeder aus einem einzigen Material besteht, dessen Eigenschaften durch klassische Theorien beschrieben werden, sowie aus Interfacen zwischen solchen Körpern. Die Interpretation dieser Situation durch Gleichungen geschieht durch das Prinzip der Trennung der Komponenten. Damit hängt die innere Mikroskalen-Energie u_k^m nur vom "Zustand" der Komponente k ab, d.h. von ρ_k und s_k^m . Die Größe α_k bezeichnet den Anteil von Komponente k in der gesamte Mischung, so daß u_k^m nicht davon abhängt. Ferner hängt u_k^m nicht von den Dichten oder Entropien der anderen Komponenten ab.

Mit dieser Motivation nehmen wir

$$u_k^m = u_k^m(\rho_k, s_k^m) \quad (6.15)$$

an. Wir schreiben $\mathbf{T}_k^m = -p_k^m \mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}_k^m$ und verwenden die Massenbilanzgleichung. Aus der Mikroskalen-Entropieungleichung (2.25) folgt dann

$$\begin{aligned} & \alpha_k \rho_k \left[\left(\theta_k^m - \frac{\partial u_k^m}{\partial s_k^m} \right) \frac{D_k s_k^m}{Dt} + \left(\frac{p_k^m}{(\rho_k)^2} - \frac{\partial u_k^m}{\partial \rho_k} \right) \frac{D_k \rho_k}{Dt} \right] + p_k^m \frac{D_k \alpha_k}{Dt} \\ & + \frac{1}{\theta_k^m} \alpha_k (\mathbf{q}_k^m + \tilde{\mathbf{Q}}_k^m) \cdot \nabla \theta_k^m - \nabla \cdot (\alpha_k \tilde{\mathbf{Q}}_k^m) + \alpha_k \boldsymbol{\tau}_k^m : \nabla \mathbf{v}_k + \alpha_k \mathcal{D}_k \\ & + \mathcal{E}_k^{\text{mi}} \left(1 - \frac{\theta_k^m}{\theta_i^m} \right) - \tilde{E}_k^m - (\theta_k^m (s_{ki}^m - s_k^m) - u_k^m) \Gamma_k \geq 0. \end{aligned} \quad (6.16)$$

Wir verwenden nun thermodynamische Standard-Argumente in dieser Ungleichung. Die Ableitung der Mikroskalen-Temperatur erscheint nicht als Argument in irgendeiner anderen Variablen in der Ungleichung (6.16). Wir gehen davon aus, daß es für jeden numerischen Wert einen Prozeß gibt, für den $D_k s_k^m / Dt$ diesen Wert annimmt, und alle anderen Größen in (6.16) verschwinden. Daraus folgt, daß der Koeffizient der Zeitableitung der Temperatur verschwinden muß. Es folgt

$$\theta_k^m = \frac{u_k^m}{s_k^m}. \quad (6.17)$$

Analog muß der Koeffizient der Ableitung der Dichte verschwinden. Wir haben somit

$$p_k^m = (\rho_k)^2 \frac{\partial u_k^m}{\partial \rho_k}. \quad (6.18)$$

Die verbleibende Mikroskalen-Entropieungleichung ist

$$\begin{aligned} & p_k^m \frac{D_k \alpha_k}{Dt} + \frac{1}{\theta_k^m} \alpha_k (\mathbf{q}_k^m + \tilde{\mathbf{Q}}_k^m) \cdot \nabla \theta_k^m - \nabla \cdot (\alpha_k \tilde{\mathbf{Q}}_k^m) + \alpha_k \boldsymbol{\tau}_k^m : \nabla \mathbf{v}_k \\ & + \alpha_k \mathcal{D}_k + \mathcal{E}_k^{\text{mi}} \left(1 - \frac{\theta_k^m}{\theta_i^m} \right) - \tilde{E}_k^m - (\theta_k^m (s_{ki}^m - s_k^m) - u_k^m) \Gamma_k \geq 0. \end{aligned} \quad (6.19)$$

Geben wir konstitutive Gleichungen für u_k^m , \mathcal{D}_k , \mathbf{q}_k^m , $\boldsymbol{\tau}_k^m$, $\mathcal{E}_k^{\text{mi}}$ und Γ_k an, so liefert diese Ungleichung Informationen über das Vorzeichen der viskosen Terme, den Wärmeflußkoeffizienten und die Beziehung zwischen bestimmten Koeffizienten in den konstitutiven Gleichungen. Verwenden wir insbesondere (6.8), so folgt

$$\begin{aligned} & p_k^m \frac{D_k \alpha_k}{Dt} + \frac{1}{\theta_k^m} \alpha_k (\mathbf{q}_k^m + \tilde{\mathbf{Q}}_k^m) \cdot \nabla \theta_k^m - \nabla \cdot (\alpha_k \tilde{\mathbf{Q}}_k^m) + \alpha \mu_{kk}^m |\mathbf{D}_k|^2 \\ & + \alpha_k \mu_{ki}^m \mathbf{D}_i : \mathbf{D}_k + \alpha_k E_{k11}^m \mathbf{v}_{ki} \cdot \mathbf{D}_k \cdot \mathbf{v}_{ki} + \alpha_k E_{k12}^m \mathbf{v}_{ki} \cdot \mathbf{D}_k \cdot \nabla \alpha_k \\ & + \alpha_k E_{k13}^m \mathbf{v}_{ki} \cdot \mathbf{D}_k \cdot \mathbf{a}_{ki} + \alpha_k \mathcal{D}_k + \mathcal{E}_k^{\text{mi}} \left(1 - \frac{\theta_k^m}{\theta_i^m} \right) - \tilde{E}_k^m - (\theta_k^m (s_{ki}^m - s_k^m) - u_k^m) \Gamma_k \geq 0. \end{aligned}$$

Nehmen wir ferner an, die Terme \tilde{E}_k^m und \mathcal{D}_k seien mechanisch insofern, als sie nicht von θ_k^m , θ_i^m oder ihren Ableitungen abhängen, so folgt

$$\mathcal{E}_k^{\text{mi}} = H_k^{\text{mi}} (\theta_i^m - \theta_k^m), \quad (6.20)$$

$$\mathbf{q}_k^m + \tilde{\mathbf{Q}}_k^m = \lambda_k^m \nabla \theta_k^m, \quad (6.21)$$

$$\Gamma_k = h_k(\theta_k^m(s_k^m - s_k^m) - u_k^m) \quad (6.22)$$

mit $H_k^{mi} \geq 0$, $\lambda_k^m \geq 0$ und $h_k \geq 0$. Ferner folgt

$$\begin{aligned} p_k^m \frac{D_k \alpha_k}{Dt} + \alpha \mu_{kk}^m |\mathbf{D}_k|^2 + \alpha_k \mu_{ki}^m \mathbf{D}_i : \mathbf{D}_k + \alpha_k E_{k11}^m \mathbf{v}_{ki} \cdot \mathbf{D}_k \cdot \mathbf{v}_{ki} + \alpha_k E_{k12}^m \mathbf{v}_{ki} \cdot \mathbf{D}_k \cdot \nabla \alpha_k \\ + \alpha_k E_{k13}^m \mathbf{v}_{ki} \cdot \mathbf{D}_k \cdot \mathbf{a}_{ki} + \alpha_k \mathcal{D}_k - \tilde{E}_k^m \geq 0. \end{aligned}$$

Nehmen wir schließlich an, daß \tilde{E}_k^m und \mathcal{D}_k keine Ableitungen höherer als erster Ordnung haben, so folgt

$$E_{k13}^m = 0, \quad p_k^m \frac{D_k \alpha_k}{Dt} + \alpha_k E_{k11}^m \mathbf{v}_{ki} \cdot \mathbf{D}_k \cdot \mathbf{v}_{ki} + \alpha_k \mathcal{D}_k - \tilde{E}_k^m = 0$$

und

$$\alpha \mu_{kk}^m |\mathbf{D}_k|^2 + \alpha_k \mu_{ki}^m \mathbf{D}_i : \mathbf{D}_k + \alpha_k E_{k12}^m \mathbf{v}_{ki} \cdot \mathbf{D}_k \cdot \nabla \alpha_k \geq 0. \quad (6.23)$$

Die Ungleichung (6.23) wird von solchen Modellen erfüllt, welche die Wechselwirkung zwischen den viskosen Kräften in den Komponenten nicht berücksichtigen, d.h., wenn $\mu_{ki}^m = 0$ und $E_{k12}^m = 0$ gelten, falls $\mu_{kk}^m \geq 0$ gilt. Sie kann ferner von Modellen erfüllt werden, die eine Beziehung zwischen \mathbf{D}_k , \mathbf{D}_i und $\mathbf{v}_{ki} \nabla \alpha_k + \nabla \alpha_k \mathbf{v}_{ki}$ annehmen. Gilt zum Beispiel

$$\mathbf{D}_i = a_{ki} \mathbf{D}_k + b_{ki} (\mathbf{v}_{ki} \nabla \alpha_k + \nabla \alpha_k \mathbf{v}_{ki}),$$

so ist (6.23) erfüllt, wenn gilt:

$$E_{k12}^m + \mu_{ki}^m b_{ki} = 0, \quad \mu_{kk}^m + \mu_{ki}^m a_{ki} \geq 0.$$

6.4.2. Mesoskalen-Betrachtungen. Die Entsprechung der Dichte für die innere Mesoskalen-Energie u_k^M ist $\alpha_k \rho_k$. Dieser Term enthält eine sehr grobe Beschreibung der Geometrie, aber es gibt noch weitere geometrische Effekte. Ferner wird aus Erfahrung die innere Mesoskalen-Energie als von der Geschwindigkeitsdifferenz $\mathbf{v}_{ki} = \mathbf{v}_k - \mathbf{v}_i$ abhängig angenommen. Wir fordern die Beobachterunabhängigkeit der inneren Mesoskalen-Energie. Dann kann gezeigt werden, daß diese Abhängigkeit auf eine Abhängigkeit nur von der Variablen $v_{ki} = |\mathbf{v}_{ki}|$ reduziert. Wir nehmen daher $u_k^M(\alpha_k \rho_k, s_k^M, v_{ki})$ an. Ferner beachten wir

$$\frac{\partial u_k^M}{\partial \mathbf{v}_{ki}} = \frac{1}{v_{ki}} \frac{\partial u_k^M}{\partial v_{ki}} \mathbf{v}_{ki}.$$

Wir schreiben $T_k^M = -p_k^M \mathbf{I} + \tau_k^M$ und verwenden die Massenbilanzgleichung. Aus der Mesoskalen-Entropiegleichung (2.26) erhalten wir dann

$$\begin{aligned} \alpha_k \rho_k \left[\left(\theta_k^M - \frac{\partial u_k^M}{\partial s_k^M} \right) \frac{D_k s_k^M}{Dt} + \left(\frac{p_k^M}{(\alpha_k \rho_k)^2} - \frac{\partial u_k^M}{\partial (\alpha_k \rho_k)} \right) \frac{D_k (\alpha_k \rho_k)}{Dt} \right. \\ \left. - \frac{\partial u_k^M}{\partial \mathbf{v}_{ki}} \cdot \frac{D_k \mathbf{v}_{ki}}{Dt} \right] + \frac{\alpha_k}{\theta_k^M} (\mathbf{q}_k^M + \tilde{\mathbf{Q}}_k^M) \cdot \nabla \theta_k^M - \nabla \cdot (\alpha_k \tilde{\mathbf{Q}}_k^M) + \mathbf{M}_k (\mathbf{v}_k - \mathbf{v}_i) - \tilde{E}_k^M \\ + \alpha_k \boldsymbol{\tau}_k^M : \nabla \mathbf{v}_k + (-\theta_k s_k^M + u_k^M) \Gamma_k \geq 0. \end{aligned} \quad (6.24)$$

Wir verwenden wiederum thermodynamische Standardargumente. Die Ableitung der Mesoskalentemperatur tritt nicht als Argument in irgend einer anderen Variablen in (6.24) auf. Wir gehen davon aus, daß es für jeden numerischen Wert einen Prozeß gibt, für den $D_k s_k^M/Dt$ diesen Wert annimmt, und alle anderen Größen in (6.24) verschwinden. Daraus folgt, daß der Koeffizient der Zeitableitung der Temperatur verschwinden muß. Es folgt

$$\theta_k^M = \frac{u_k^M}{s_k^M}. \quad (6.25)$$

Setzen wir (6.7) und (6.8) für die Interface-Kraftdichte und die Mesoskalenspannung ein, so folgt

$$\begin{aligned} & \alpha_k \rho_k \left[\left(\frac{p_k^M}{(\alpha_k \rho_k)^2} - \frac{\partial u_k^M}{\partial(\alpha_k \rho_k)} \right) \frac{D_k(\alpha_k \rho_k)}{Dt} + \frac{\partial u_k^M}{\partial \mathbf{v}_{ki}} \cdot \frac{D_k \mathbf{v}_{ki}}{Dt} \right] \\ & + \frac{\alpha_k}{\theta_k^M} (\mathbf{q}_k^M + \tilde{\mathbf{Q}}_k^M) \cdot \nabla \theta_k^M - \nabla \cdot (\alpha_k \tilde{\mathbf{Q}}_k^M) + A_{k1} |\mathbf{v}_{ki}|^2 + A_{k2} \nabla \alpha_k \cdot \mathbf{v}_{ki} \\ & + A_{k3} \mathbf{a}_{ki} \cdot \mathbf{v}_{ki} + B_{k11} \mathbf{v}_{ki} \cdot \mathbf{D}_k \cdot \mathbf{v}_{ki} + B_{k12} \mathbf{v}_{ki} \cdot \mathbf{D}_i \cdot \mathbf{v}_{ki} \\ & - \tilde{E}_k^M + \alpha_k \mu_{kk}^M |\mathbf{D}_k|^2 + \alpha_k \mu_{ki}^M \mathbf{D}_i : \mathbf{D}_k + \alpha_k E_{k11}^M \mathbf{v}_{ki} \cdot \mathbf{D}_k \cdot \mathbf{v}_{ki} \\ & + \alpha_k E_{k12}^M \mathbf{v}_{ki} \cdot \mathbf{D}_k \cdot \nabla \alpha_k + \alpha_k E_{k13}^M \mathbf{v}_{ki} \cdot \mathbf{D}_k \cdot \mathbf{a}_{ki} (-\theta_k s_k^M + u_k^M) \Gamma_k \geq 0. \end{aligned} \quad (6.26)$$

Wir beachten, daß

$$\mathbf{a}_{ki} \cdot \mathbf{v}_{ki} = \frac{D_k v_{ki}^2 / 2}{Dt} + \mathbf{v}_{ki} \cdot \mathbf{D}_i \cdot \mathbf{v}_{ki}$$

gilt. Nehmen wir ferner an, daß die in (6.26) auftretenden Größen keine Ableitungen höherer als erster Ordnung haben, so folgt

$$E_{k13}^M = 0$$

und

$$\mathbf{q}_k^M + \tilde{\mathbf{Q}}_k^M = \lambda_k^M \nabla \theta_k^M, \quad \lambda_k^M \geq 0.$$

Zu den hier getroffenen Modellannahmen konsistent ist

$$\mathbf{Q}_k^M = C_k^M(\alpha_k, v_{ki}) \mathbf{v}_{ki}.$$

Dann gilt

$$\nabla \cdot (\alpha_k \tilde{\mathbf{Q}}_k^M) = \frac{\partial(\alpha_k C_k^M)}{\partial \alpha_k} \mathbf{v}_{ki} \cdot \nabla \alpha_k + \alpha_k C_k^M \nabla \cdot \mathbf{v}_{ki} + \alpha_k \frac{\partial C_k^M}{\partial v_{ki}} \mathbf{v}_{ki} \cdot \nabla v_{ki} \cdot \alpha_k.$$

Andererseits gilt

$$\nabla v_{ki} = \nabla (\mathbf{v}_{ki} \cdot \mathbf{v}_{ki})^{1/2} = \frac{1}{v_{ki}} \mathbf{v}_{ki} \cdot (\mathbf{D}_k - \mathbf{D}_i).$$

Ferner schreiben wir den Deformationstensor als Summe eines deviatorischen und eines sphärischen Teils, sodaß

$$\mathbf{D}_k = \mathbf{D}_k^D + \frac{1}{3} (\text{tr } \mathbf{D}_k) \mathbf{I} = \mathbf{D}_k^D + \frac{1}{3} (\nabla \cdot \mathbf{v}_k) \mathbf{I}$$

mit $\text{tr } \mathbf{D}_k = 0$. Aus der Massenerhaltungsgleichung folgt

$$\nabla \cdot \mathbf{v}_k = -\frac{1}{\alpha_k \rho_k} \left(\frac{D_k(\alpha_k \rho_k)}{Dt} - \Gamma_k \right).$$

Wir erhalten somit

$$\begin{aligned} & \alpha_k \rho_k \left[\left(\frac{A_{k13}}{\alpha_k \rho_k} \mathbf{v}_{ki} - \frac{\partial u_k^M}{\partial \mathbf{v}_{ki}} \right) \cdot \frac{D_k \mathbf{v}_{ki}}{Dt} \right. \\ & + \frac{1}{(\alpha_k \rho_k)^2} \left(p_k^M - \frac{\alpha_k \rho_k}{3} \left\{ (B_{k11} + \alpha_k E_{k11}^M) v_{ki}^2 - \alpha_k C_k^M - \alpha_k \frac{\partial C_k^M}{\partial v_{ki}} v_{ki} \right\} \right. \\ & \quad \left. \left. - \frac{\partial u_k^M}{\partial (\alpha_k \rho_k)} \right) \frac{D_k(\alpha_k \rho_k)}{Dt} \right] + \frac{\alpha_k}{\theta_k^M} (\mathbf{q}_k^M + \tilde{\mathbf{Q}}_k^M) \cdot \theta_k^M - \tilde{E}_k^M \\ & + (A_{k1} + \alpha_k C_k^M \nabla \cdot \mathbf{v}_i) |\mathbf{v}_{ki}|^2 + (A_{k2} + \alpha_k E_{k12}^M \nabla \cdot \mathbf{v}_k) \nabla \alpha_k \cdot \mathbf{v}_{ki} \\ & + \left(B_{k11} + \alpha_k E_{k11}^M - \alpha_k \frac{\partial C_k^M}{\partial v_{ki}} \right) \mathbf{v}_{ki} \cdot \mathbf{D}_k^D \cdot \mathbf{v}_{ki} \\ & + \left(B_{k12} + \alpha_k \frac{\partial C_k^M}{\partial v_{ki}} \mathbf{v}_{ki} \right) \mathbf{v}_{ki} \cdot \mathbf{D}_i \cdot \mathbf{v}_{ki} + \alpha_k E_{k12}^M \mathbf{v}_{ki} \cdot D_k^D \cdot \nabla \alpha_k + \alpha_k \mu_{kk}^M |\mathbf{D}_k|^2 \\ & + \alpha_k \mu_{ki}^M \mathbf{D}_i : \mathbf{D}_k + ((B_{k11} + \alpha_k E_{k11}^M) v_{ki}^2 - \theta_k^M s_k^M + u_k^M) \Gamma_k \geq 0. \end{aligned} \quad (6.27)$$

Da $D_k(\alpha_k \rho_k)/Dt$ und $D_k \mathbf{v}_{ki}/Dt$ beliebige Werte annehmen können, gilt

$$\begin{aligned} p_k^M &= \frac{\alpha_k \rho_k}{3} (B_{k11} + \alpha_k E_{k11}^M) v_{ki}^2 - \alpha_k C_k^M - \alpha_k \frac{\partial C_k^M}{\partial v_{ki}} v_{ki} + (\alpha_k \rho_k)^2 \frac{\partial u_k^M}{\partial (\alpha_k \rho_k)}, \\ \frac{\partial u_k^M}{\partial \mathbf{v}_{ki}} &= \frac{A_{k13}}{\alpha_k \rho_k} \mathbf{v}_{ki}. \end{aligned}$$

Die verbleibende Entropiegleichung ist

$$\begin{aligned} & \frac{\alpha_k}{\theta_k^M} \lambda_k^M |\nabla \theta_k^M|^2 - \tilde{E}_k^M + (A_{k1} + \alpha_k C_k^M \nabla \cdot \mathbf{v}_i) |\mathbf{v}_{ki}|^2 \\ & + (A_{k2} + \alpha_k E_{k12}^M \nabla \cdot \mathbf{v}_k) \nabla \alpha_k \cdot \mathbf{v}_{ki} + \left(B_{k11} + \alpha_k E_{k11}^M - \alpha_k \frac{\partial C_k^M}{\partial v_{ki}} \right) \mathbf{v}_{ki} \cdot \mathbf{D}_k^D \cdot \mathbf{v}_{ki} \\ & + \left(B_{k12} + \alpha_k \frac{\partial C_k^M}{\partial v_{ki}} \mathbf{v}_{ki} \right) \mathbf{v}_{ki} \cdot \mathbf{D}_i \cdot \mathbf{v}_{ki} + \alpha_k E_{k12}^M \mathbf{v}_{ki} \cdot D_k^D \cdot \nabla \alpha_k + \alpha_k \mu_{kk}^M |\mathbf{D}_k|^2 \\ & + \alpha_k \mu_{ki}^M \mathbf{D}_i : \mathbf{D}_k + ((B_{k11} + \alpha_k E_{k11}^M) v_{ki}^2 - \theta_k^M s_k^M + u_k^M) \Gamma_k \geq 0. \end{aligned} \quad (6.28)$$

Nehmen wir

$$A_{k1} + \alpha_k C_k^M \nabla \cdot \mathbf{v}_i = S_k \quad (6.29)$$

an und gruppieren die positiv definiten Terme

$$\frac{\alpha_k}{\theta_k^M} \lambda_k^M |\theta_k^M|^2 + S_k |\mathbf{v}_{ki}|^2 + \alpha_k \mu_{kk}^M |\mathbf{D}_k|^2 + \alpha_k \mu_{ki}^M \mathbf{D}_i : \mathbf{D}_k \geq 0,$$

so folgt

$$\begin{aligned}
\tilde{E}_k^M &= (A_{k2} + \alpha_k E_{k12}^M \nabla \cdot \mathbf{v}_k) \nabla \alpha_k \cdot \mathbf{v}_{ki} + \left(B_{k11} + \alpha_k E_{k11}^M - \alpha_k \frac{\partial C_k^M}{\partial v_{ki}} \right) \mathbf{v}_{ki} \cdot \mathbf{D}_k^D \cdot \mathbf{v}_{ki} \\
&+ \left(B_{k12} + \alpha_k \frac{\partial C_k^M}{\partial v_{ki}} \mathbf{v}_{ki} \right) \mathbf{v}_{ki} \cdot \mathbf{D}_i \cdot \mathbf{v}_{ki} + \alpha_k E_{k12}^M \mathbf{v}_{ki} \cdot D_k^D \cdot \nabla \alpha_k \\
&+ ((B_{k11} + \alpha_k E_{k11}^M) v_{ki}^2 - \theta_k^M s_k^M + u_k^M) \Gamma_k.
\end{aligned} \tag{6.30}$$

Bewegungsgleichungen für eine niedrig konzentrierte Strömung

7.1. Konstitutive Gleichungen

Konstitutive Gleichungen erfordern, wie wir gesehen haben, eine Vielzahl von Konstanten und Modellfunktionen. Um Gleichungen zur Beschreibung einer Mehrkomponentenströmung zu gewinnen, ist es hilfreich, Experimente zu finden, die bestimmte Phänomene isolieren und (relativ) direkte Messungen der hiervon betroffenen unbekanntenen Koeffizienten ermöglichen. Das physikalische Experiment sollte einfach sein und einer einfachen Lösung der Gleichung entsprechen, welche am meisten von der auszuwertenden konstitutiven Form abhängig sein sollte. Beispiele solcher Strömungen werden manchmal “viskometrische” Experimente genannt.

Drei wichtige, fundamentale Bewegungen für Mehrkomponenten-Materialien sind die Sedimentation, die Scherströmung und die Wellenausbreitung. Die Einfachheit der Lösungen dieser Probleme und ihre experimentelle Zugänglichkeit erlauben die Auswahl und die Bewertung konstitutiver Gleichungen.

7.1.1. Spannung. Wir führen die üblichen Indices C für die kontinuierliche und D für die disperse Phase ein; C bezeichnet in jedem Fall eine fluidartige Phase. Wir behandeln zunächst konstitutive Gleichungen für den Druck sowohl in der kontinuierlichen Phase als auch in der Partikel-Komponente. Wir behandeln dann die Scherung oder den Extra-Spannungstensor in einer viskosen Fluidkomponente, und schließlich dieselben Größen in der partikulären Komponente einer Partikel-Fluid-Strömung.

Zusätzlich zu den ‘bulk’-Spannungen in beiden Komponenten ist es nützlich, Ausdrücke für gemittelte Interface-Werte dieser Spannungen zu haben:

$$\mathbf{T}_{ki} = -p_{ki}\mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}_{ki}, \quad k \in \{C, D\}.$$

Ist eine Komponente in der anderen fein verteilt, dann unterscheidet sich der Druck in der dispersen Komponente nicht sehr von dem Interface-Wert. Für eine disperse Strömung nehmen wir daher $p_{Di} = p_D$ an.

Bei konstanter Oberflächenspannung und kugelförmigen Blasen oder Tropfen verwenden wir die klassische Laplace-Form

$$p_{Ci} = p_{Di} - H\sigma,$$

wobei H die mittlere Interface-Krümmung und σ die Oberflächenspannung ist. Ist die disperse Komponente kugelförmig, so gilt $H = 2/r_D$ mit dem Partikelradius r_D .

Das “Bernoulli-Theorem” für die Druckänderung in einem strömenden viskosen Fluid legt die Gleichung

$$P_{Ci} = p_C - \xi \rho_C |\mathbf{v}_C - \mathbf{v}_D|^2 \quad (7.1)$$

nahe. Die (hier nicht ausgeführten) Rechnungen für eine nichtviskose Strömung um eine einzelne Kugel liefern $\xi = 1/4$, wenn die Grenzschicht an dem Partikel haften bleibt; umgekehrt folgt bei Strömungen mit niedriger Reynolds-Zahl $\xi = -9/32$. Da (7.1) offenbar sowohl für nichtviskose als auch für stark viskose Strömungen gilt, kann eine ähnliche Form in allgemeinen Fällen erwartet werden; wir nehmen daher $\xi = \xi(\alpha_k, Re_k)$ an.

Es ist schwieriger, den “Druck” als Feststoffkomponente zu interpretieren. In der Strömung einer Partikel-Fluid-Mischung haben die Feststoffpartikel eine Vielzahl von Rollen bei der Impulsübertragung: sie sind “Spannungsüberträger”, die die Scherspannung und den Druck in der Flüssigkeit transportieren und konzentrieren; eine Impulsübertragung findet durch Kontakt statt: berühren sich die Partikel, so verhalten sie sich wie ein Festkörper insofern, als Spannungen elastisch übertragen werden können; und es findet eine Impulsübertragung durch zufällige Bewegungen um eine mittlere Bewegung statt, wobei natürlich Kollisionen auftreten.

Der Mikroskalendruck wird als $p_{Di} = p_D$ angenommen.

Sind die Partikel derart konzentriert, daß sie einen kohärenten Festkörper mit Poren bilden, welche von der Flüssigkeit ausgefüllt werden, dann ist es angemessener, die Begriffe der elastischen und der plastischen Deformation zu verwenden, wie sie in der Bodenmechanik geläufig sind. Ein einfaches Modell dieses Typs (siehe auch [2, 3]) ignoriert das plastische Verhalten und nimmt an, daß, wenn die Partikel hoch genug konzentriert sind, der Druck eine Funktion des Volumenanteils ist:

$$p_D = \begin{cases} 0 & \text{falls } \alpha_D \leq \alpha_{\text{cont}}, \\ p_{\text{cont}}(\alpha_D) & \text{falls } \alpha_D > \alpha_{\text{cont}}, \end{cases}$$

wobei die Funktion $p_{\text{cont}}(\alpha_D)$ experimentell bestimmt werden kann, indem man die Partikel statisch kompaktiert und die zur Volumenänderung benötigte Kraft bestimmt.

Der komplizierte Fall tritt bei Kollisionen auf. In diesem Fall wird Spannung durch die Partikel übertragen, und die fluktuierenden Bewegungen der Partikel selbst übertragen Impuls. Wir betrachten nur das Modell für die Reynolds-Spannung; diese wird durch die Geschwindigkeitsfluktuationen verursacht. Der Druck ist der sphärische Teil des Impulstensors und ist durch die fluktuierende kinetische Energie gegeben als

$$p_D^{\text{Re}} = R \alpha_D \rho_D u_D^{\text{Re}}$$

mit $R = 2/3$ für reibungsfreie Kollisionen.

In Dampf-Flüssig-Systemen sind wenige Strömungen derart langsam, daß viskose Kräfte turbulente Spannungen dominieren. Viele Strömungen beinhalten jedoch eine Grenzschicht, die einen Strömungswiderstand hervorruft. Viskose Kräfte liefern einen signifikanten Beitrag zum Strömungswiderstand. Diese Effekte sind auch die Ursache für die Komponentenverteilung, die für die Ermittlung von Profilparametern wichtig ist (bedeutend etwa für die 1-D-Modellierung).

In niedrig konzentrierten Strömungen kann die Spannung der dispersen Komponente nur wenig vom Interface-Wert abweichen, also $\boldsymbol{\tau}_{\text{Di}} = \boldsymbol{\tau}_{\text{D}}$. Die Annahme der Abwesenheit von Marangoni-Effekten (etwa solcher, die durch temperaturgetriebene Oberflächenspannungsgradienten entstehen) führt auf $\boldsymbol{\tau}_{\text{Ci}} = \boldsymbol{\tau}_{\text{Di}}$.

Eine allgemeine Annahme für den Spannungstensor der kontinuierlichen Komponente ist

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\tau}_{\text{C}} = & \sum_j \mu_{\text{C}j} \mathbf{D}_j + \sum_{j,k,l} \gamma_{\text{C}jkl} (\nabla \alpha_j (\mathbf{v}_k - \mathbf{v}_l) + (\mathbf{v}_k - \mathbf{v}_l) \nabla \alpha_j) \\ & + \sum_{j,k,l,m} a_{\text{C}jklm} ((\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_k)(\mathbf{v}_l - \mathbf{v}_m) + (\mathbf{v}_l - \mathbf{v}_m)(\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_k)), \end{aligned}$$

wobei $\mu_{\text{CC}}(\alpha_{\text{D}})$ die effektive Fluid-Viskosität der Flüssigkeit und $\mu_{\text{CD}}(\alpha_{\text{D}})$ die Fluid-‘Kreuz’-Viskosität ist. Dies schließt z.B. das Lundgren-Modell ein für

$$\mu_{\text{CC}} = \mu_{\text{f}}, \quad \mu_{\text{CD}} = \frac{\alpha_{\text{f}}}{1 - \alpha_{\text{D}}} \mu_{\text{f}}, \quad \gamma_{\text{CDDC}} = \mu_{\text{f}}.$$

Die viskose Scherspannung des Fluids wird durch die Feststoffpartikel “konzentriert”, was darin resultiert, daß die “effektive” Viskosität einer Suspension größer als die des Fluids ist [7, Ch. 15]. Um dies wiederzugeben, könnte man z.B. $\boldsymbol{\tau}_{\text{Ci}} = \beta \boldsymbol{\tau}_{\text{C}}$ verwenden, wobei $\boldsymbol{\tau}_{\text{Ci}}$ der gemittelte Interface-Fluid-Spannungstensor ist. Für niedrig konzentrierte Suspensionen kugelförmiger Partikel gilt etwa $\beta = 5/2$. In einem kompaktierten Partikelbett mit einem Porenfluid wird die Scherspannung durch eine elastische Spannungs-Dehnungs-Beziehung für kleine Schubspannungen und durch ein plastisches Modell für Spannungen, die eine Nachgebenspannung (yield stress) erreichen für die Partikel verwendet.

Findet der Impulstransfer vor allem durch Kollisionen statt, dann kann die Spannung auf die fluktuierende kinetische Energie u_{D}^{Re} bezogen werden; man erhält dann mit dem Partikelradius a

$$\boldsymbol{\tau}_{\text{D}} = \gamma_{\rho} \rho_{\text{D}} a (u_{\text{D}}^{\text{Re}})^{1/2} \text{sym} \nabla \mathbf{v}_{\text{D}}.$$

7.1.2. Reynolds-Spannung. Wir benötigen eine konstitutive Annahme für den Reynolds-Spannungstensor der kontinuierlichen Komponente:

$$\boldsymbol{\tau}_{\text{C}}^{\text{Re}} = \sum_j \mu_{\text{C}j}^{\text{Re}} \mathbf{D}_j + \sum_{j,k,l} \gamma_{\text{C}jkl}^{\text{Re}} (\nabla \alpha_j (\mathbf{v}_k - \mathbf{v}_l) + (\mathbf{v}_k - \mathbf{v}_l) \nabla \alpha_j) \quad (7.2)$$

$$+ \sum_{j,k,l,m} a_{\text{C}jklm}^{\text{Re}} ((\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_k)(\mathbf{v}_l - \mathbf{v}_m) + (\mathbf{v}_l - \mathbf{v}_m)(\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_k)), \quad (7.3)$$

wobei $\mu_{\text{CC}}^{\text{Re}}$ die Wirbelviskosität der Fluid-Turbulenz ist. Aus der Analysis für ein nicht-viskoses Fluid folgt

$$a_{\text{CDDC}}^{\text{Re}} = -\frac{1}{20}, \quad p_{\text{C}}^{\text{Re}} = \frac{3}{2} \alpha_{\text{D}} \rho_{\text{C}} |\mathbf{v}_{\text{D}} - \mathbf{v}_{\text{C}}|^2.$$

7.1.3. Interface-Kräfte. Häufig schreibt man

$$\mathbf{M}_k = p_{ki} \nabla \alpha_k - \boldsymbol{\tau}_{ki} \cdot \nabla \alpha_k + \mathbf{M}'_k,$$

wobei p_{ki} und $\boldsymbol{\tau}_{ki}$ der interface-gemittelte Druck und die Scherspannung von Komponente k sind. Wir nehmen an:

$$\mathbf{M}'_k = \mathbf{M}'_k \left(\alpha_k, \nabla \alpha_k, \mathbf{v}_D, \mathbf{v}_C, \frac{\partial \mathbf{v}_D}{\partial t}, \frac{\partial \mathbf{v}_C}{\partial t}, \nabla \mathbf{v}_D, \nabla \mathbf{v}_C, \dots \right),$$

wobei “...” skalare Größen und intrinsische Parameter (etwa: Tropfen- bzw. Blasenradius) und die Interface-Flächendichte enthält. Wir schreiben \mathbf{M}'_D als Summe von Kräften, die mit Hemmung (drag), virtueller Masse, Turbulenz etc. verbunden sind: $\mathbf{M}'_D = \Sigma \mathbf{F}_n$.

Die ‘Drag’-Kraft auf ein einzelnes Partikel ist die Kraft, die es ‘fühlt’, wenn es sich mit konstanter Geschwindigkeit durch die umgebende Flüssigkeit bewegt. (Die wird auch bei ganzen Partikelschwärmen auf stationäre Kräfte zurückgeführt.) Üblicherweise wird ein Koeffizient C_D angenommen mit

$$\mathbf{F}_D = \frac{3}{8} \frac{\alpha_D \rho_C C_D}{r_D} |\mathbf{v}_C - \mathbf{v}_D| (\mathbf{v}_C - \mathbf{v}_D),$$

wobei C_D eine Funktion von α_D und

$$\text{Re}_D = \frac{r_D |\mathbf{v}_D - \mathbf{v}_C|}{\nu_C},$$

ist; hierbei ist ν_C die Fluid-Viskosität. Solche Funktionen C_D werden u.a. bei Ishii [9], Ishii und Zuber [10] und Concha und Almendra [6] angegeben.

Für blasenförmige Strömungen, im sogenannten Stokes-Regime, gilt

$$C_D = \frac{24}{\text{Re}_{2\phi}}, \quad \text{Re}_{2\phi} := \frac{2r_D \rho_C |\mathbf{v}_D - \mathbf{v}_C|}{\mu_m}$$

mit der Mischungsviskosität

$$\mu_m = \mu_C \left(\frac{1 - \alpha_D}{\alpha_{Dm}} \right)^{-2.5 \alpha_{Dm} \frac{\mu_D + 0.4 \mu_C}{\mu_D + \mu_C}},$$

wobei der Parameter α_{km} die Volumenfraktion von Komponente k bei der maximalen Packungsdichte ist. Für Reynolds-Zahlen größer als eins ist die Strömung im ungestörten Partikel-Regime, und wir erhalten die Gleichung

$$C_D = \frac{24}{\text{Re}_{2\phi}} (1 + 0.1 \text{Re}_{2\phi}^{0.75}).$$

Für größere Blasen, im Größenbereich

$$r_D^* = r_D \left(\frac{\rho_C (\rho_C - \rho_D) g}{\mu_C} \right)^{1/3} > 34.65,$$

folgt

$$C_D = 0.45 \left(\frac{1 + 17.67 (f(\alpha_D))^{6/7}}{18.67 f(\alpha_D)} \right)^2,$$

wobei die Funktion f auch die Viskositätsparameter enthält:

$$f(\alpha_D) = (1 - \alpha_D)^{1/2} \frac{\mu_C}{\mu_m}.$$

Gilt

$$\frac{\mu_C}{\left[\rho_C \sigma \left(\frac{\sigma}{g(\rho_C - \rho_D)} \right)^{1/2} \right]^{1/2}} > 0.11 + \frac{1 + \psi}{\psi^{8/3}}, \quad \psi = 0.55 \left[(1 + 0.08(r_D^*)^3)^{4/7} - 1 \right]^{0.75},$$

dann ist die Strömung im partikelgestörten Regime und es gilt

$$C_D = \frac{4}{3} r_D \left(\frac{(\rho_C - \rho_D)g}{\sigma} \right)^{1/2} \left(\frac{1 + 17.67(f(\alpha_D))^{6/7}}{18.67f(\alpha_D)} \right)^2.$$

Im aufgewühlten turbulenten Regime gilt [10]

$$C_D = \frac{8}{3} (1 - \alpha_D)^2.$$

Die virtuelle Massenkraft ist die auf ein sich bewegendes Objekt ausgeübte Kraft, wenn es sich beschleunigt. Ist ein Objekt in eine Flüssigkeit eongetaucht und wird es beschleunigt, so beschleunigt es auch etwas von dieser Flüssigkeit. Dies wird in [7, Ch. 15] im einzelnen berechnet. Wir erhalten

$$\mathbf{F}_{VM} = C_{VM} \alpha_D \rho_C \left[\frac{\partial \mathbf{v}_C}{\partial t} + \mathbf{v}_C \cdot \nabla \mathbf{v}_C - \left(\frac{\partial \mathbf{v}_D}{\partial t} + \mathbf{v}_D \cdot \nabla \mathbf{v}_D \right) \right]$$

mit dem virtuellen Massenkoeffizienten C_{VM} ; z.B. $C_{VM} = 1/2$ für niedrig konzentrierte Suspensionen.

Ist das Fluid in Scherbewegung, so erfährt es eine zur Bewegungsrichtung transversale Kraft ("lift force")

$$\mathbf{F}_L = -C_L \alpha_D \rho_C (\mathbf{v}_C - \mathbf{v}_D) \times (\nabla \times \mathbf{v}_C),$$

wobei $C_L = 1/4$ für niedrig konzentrierte Suspensionen gilt. Schließlich gibt es noch eine Rotationskraft

$$\mathbf{F}_{rot} = -C_{rot} (\mathbf{v}_C - \mathbf{v}_D) \times (\nabla \times \mathbf{v}_D),$$

wobei ebenfalls $C_{rot} = 1/4$ für niedrig konzentrierte Suspensionen gilt. Man beachte, daß \mathbf{F}_{VM} , \mathbf{F}_L and \mathbf{F}_{rot} nicht separat beobachterunabhängig sind. Mit $C_{VM} = 1/2$, $C_L = 1/4$ und $C_{rot} = 1/4$ ist die Summe $\mathbf{F}_{VM} + \mathbf{F}_L + \mathbf{F}_{rot}$ jedoch beobachterunabhängig. Die Objektivität verlangt $C_L + C_{rot} = C_{VM}$. Im allgemeinen ist $C_{VM} = C_{VM}(\alpha_D, Re_D)$; Zuber [16] erhält

$$C_{VM} \approx \frac{1}{2} + \frac{3}{2} \alpha_D.$$

Für die turbulente Dispersion folgt

$$\mathbf{F}_{TD} = \hat{C}_{TD} \cdot \frac{3}{8} \frac{\alpha_D \rho_C C_D}{r_D} |\mathbf{v}_C - \mathbf{v}_D| \mathbf{T}_C \cdot \nabla \alpha_D,$$

wobei $\hat{C}_{\text{TD}} = 1$ eine gute Näherung für kleine Partikel ist und wir die Notation

$$C_{\text{TD}} = \hat{C}_{\text{TD}} \frac{3}{8} \frac{\alpha_{\text{D}} \rho_{\text{C}} C_{\text{D}}}{r_{\text{D}}} |\mathbf{v}_{\text{C}} - \mathbf{v}_{\text{D}}|$$

einführen.

Andere Kräfte, die manchmal den Interface-Termen zugeordnet werden, können aus der (hier nicht gebrachten) Umströmung einer Einzelkugel berechnet werden (siehe [7] für Einzelheiten). Andere gelegentlich verwendete Kräfte sind die Faxén- und Basset-Kräfte, die beide von viskosen Effekten herrühren. Für die Faxén-Kraft gilt

$$\mathbf{F}_{\text{F}} = C_{\text{F}} \alpha_{\text{D}} \mu_{\text{C}} \nabla^2 \mathbf{v}_{\text{C}}$$

für Einzelkugeln (und damit für niedrig konzentrierte Suspensionen).

Die Basset-Kraft ist eine nichtstationäre Kraft, die mit einer viskosen Grenzschichtbildung zusammenhängt. Wird eine flache Scheibe ruckartig parallel zu sich selbst bewegt, so erfährt sie eine zu $t^{-1/2}$ proportionale Kraft. Basset (Bassett, 1888; zitiert in [7]) berechnete analoge Kraft, die auf eine Einzelkugel wirkt:

$$\mathbf{F}_{\text{B}} = \frac{9\alpha_{\text{D}}}{2r_{\text{D}}} \left(\frac{\rho_{\text{C}} \mu_{\text{C}}}{\pi} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^t \frac{\mathbf{a}(\mathbf{x}, \tau)}{\sqrt{t - \tau}} d\tau$$

mit dem beobachterunabhängigen Vektor

$$\mathbf{a} = \frac{\partial \mathbf{v}_{\text{C}}}{\partial t} + \mathbf{v}_{\text{C}} \cdot \nabla \mathbf{v}_{\text{C}} - \left(\frac{\partial \mathbf{v}_{\text{D}}}{\partial t} + \mathbf{v}_{\text{D}} \cdot \nabla \mathbf{v}_{\text{D}} \right) - (\mathbf{v}_{\text{C}} - \mathbf{v}_{\text{D}}) \times (\nabla \times \mathbf{v}_{\text{C}}).$$

7.1.4. Impulsquellen. Ishii [9] gibt für den durch Oberflächenspannung verursachten Impulsquellterm als

$$\mathbf{m} = H\sigma \nabla \alpha_{\text{D}}$$

an. Das Interface-Spannungs-Modell liefert

$$\mathbf{M}_{\text{D}} + \mathbf{M}_{\text{C}} = \nabla \cdot \mathbf{T}_{\text{I}},$$

wobei die über das Interface übertragene Spannung durch

$$\mathbf{T}_{\text{I}} = \alpha_{\text{D}} (\bar{p}_{\text{Di}} + \bar{p}_{\text{Ci}}) \mathbf{I} + a_i \alpha_{\text{D}} \rho_{\text{C}} (b_i |\mathbf{v}_{\text{D}} - \mathbf{v}_{\text{C}}|^2 \mathbf{I} + a_i (\mathbf{v}_{\text{D}} - \mathbf{v}_{\text{C}})(\mathbf{v}_{\text{D}} - \mathbf{v}_{\text{C}})), \quad a_i = -\frac{9}{2}, \quad b_i = \frac{3}{20}$$

gegeben ist.

7.1.5. Wärmefluß. Durch Mittelung des exakten Flusses $\mathbf{q} = -k_k \nabla \theta$ folgt der Wärmefluß

$$\mathbf{q}_k = -k_k \nabla \theta_k^{\text{m}} + k_k \frac{\gamma_k(\alpha_k)}{2\alpha_k} \nabla \alpha_k (\theta_i - \theta_k^{\text{m}}),$$

wobei $\gamma_k(\alpha_k)$ die thermische Mobilität von Komponente k und θ_i die gemittelte Interface-Temperatur sind.

Der turbulente Wärmefluß ist

$$\hat{\mathbf{q}}_{\text{C}}^{\text{Re}} = d_{\text{C}} \alpha_{\text{D}} \rho_{\text{C}} (\mathbf{v}_{\text{C}} - \mathbf{v}_{\text{D}}) (\theta_{\text{C}} - \theta_{\text{D}}) + k_{\text{C}}^{\text{Re}} \theta_{\text{C}}^{\text{M}},$$

$$\hat{\mathbf{q}}_D^{\text{Re}} = d_D \alpha_D \rho_D (\mathbf{v}_C - \mathbf{v}_D) (\theta_C - \theta_D) + k_D^{\text{Re}} \theta_D^M,$$

wobei d_k ein Parameter ist und k_C^{Re} und c_C die spezifischen Wärmen des Dampfes bzw. der Flüssigkeit bei konstantem Volumen sind.

Der turbulente kinetische Energiefluß ist

$$\mathbf{q}_C^K = f_C \alpha_D \rho_C |\mathbf{v}_C - \mathbf{v}_D|^2 (\mathbf{v}_C - \mathbf{v}_D), \quad \mathbf{q}_D^K = f_D \alpha_D \rho_D |\mathbf{v}_C - \mathbf{v}_D|^2 (\mathbf{v}_C - \mathbf{v}_D), \quad f_C = \frac{1}{40}.$$

Wir betrachten nun die Interface-Energiequelle. Wir schreiben

$$E_k = \mathbf{q}_{ki} \cdot \nabla \alpha_k + E'_k,$$

wobei \mathbf{q}_{ki} der meistens nicht beachtete Interface-Energiefluß ist. Wir schlagen

$$\mathbf{q}_{Di} = \mathbf{q}_D$$

und

$$\mathbf{q}_{Ci} = \mathbf{q}_{Di} + h_{CD} \Gamma_D$$

vor, wobei h_{CD} die latente Wärme ist. Der Term E'_k wird i.a. als

$$E'_k = H_k (\theta_i - \theta_k^m)$$

angesetzt, wobei θ_i die Interface-Temperatur ist und H_k der zugehörige Wärmeleitkoeffizient; im allgemeinen gilt $H_k = H_k(\alpha_k, r_D, \dots)$. Für die Interface-Energiequelle nehmen wir an

$$\varepsilon = \theta_i \left(\frac{d\sigma}{d\theta_i} \right) \left(\frac{\partial H}{\partial t} + \mathbf{v}_i \cdot \nabla H \right) + H \sigma \frac{\partial \alpha_D}{\partial t} + \varepsilon',$$

wobei der Ausdruck ε' meistens vernachlässigt wird.

Die Interface-Arbeit wird durch folgende Gleichung auf die Interface-Kraft bezogen:

$$\begin{aligned} W'_k = & C_W \alpha_D \rho_C \mathbf{a} \cdot (\mathbf{v}_D - \mathbf{v}_C) + W_p \rho_C \left(\frac{\partial \alpha_D}{\partial t} + \mathbf{v}_D \cdot \nabla \alpha_D \right) + H_W \rho_C (\mathbf{v}_D - \mathbf{v}_C) \cdot \nabla \alpha_D \\ & + J_W \rho_C |\mathbf{v}_D - \mathbf{v}_C|^2 (\mathbf{v}_D - \mathbf{v}_C) \cdot \nabla \alpha_D + K_W \rho_C |\mathbf{v}_D - \mathbf{v}_C|^2 \left(\frac{\partial \alpha_D}{\partial t} + \mathbf{v}_D \cdot \nabla \alpha_D \right) \quad (7.4) \\ & + B_W \alpha_D \rho_C (\mathbf{v}_D - \mathbf{v}_C) (\mathbf{v}_D - \mathbf{v}_C) : \mathbf{D}_C + Q_W \alpha_D \rho_C (\mathbf{v}_D - \mathbf{v}_C) (\mathbf{v}_D - \mathbf{v}_C) : \mathbf{D}_D \\ & + R_W \alpha_D \rho_C |\mathbf{v}_D - \mathbf{v}_C|^2 \nabla \cdot (\mathbf{v}_D - \mathbf{v}_C) + P_W \alpha_D \rho_C |\mathbf{v}_D - \mathbf{v}_C|^2 \nabla \cdot \mathbf{v}_C, \end{aligned}$$

wobei die in (7.4) auftretenden Koeffizienten durch Arnold (1988; zitiert in [7]) berechnet wurden:

$$\begin{aligned} C_W = \frac{1}{2}, \quad W_p = 1, \quad H_W = 1, \quad J_W = \frac{1}{5}, \quad K_W = \frac{1}{4}, \\ B_W = -\frac{9}{20}, \quad Q_W = -\frac{1}{10}, \quad R_W = \frac{1}{5}, \quad P_W = \frac{3}{20}. \end{aligned}$$

7.2. Bewegungsgleichungen

Wir geben nun Bewegungsgleichungen an, die viele verschiedene Effekte berücksichtigen. Wir nehmen $\Gamma_k = 0$ an. Verwenden wir die Beziehungen zwischen konstitutiven Gleichungen für die Spannungen und den Interface-Kraftdichten, so lauten die Bewegungsgleichungen für eine Partikel-Fluid-Mischung

$$\frac{\partial(\alpha_D \rho_D)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_D \rho_D \mathbf{v}_D) = 0, \quad (7.5)$$

$$\frac{\partial(\alpha_C \rho_C)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_C \rho_C \mathbf{v}_C) = 0, \quad (7.6)$$

$$\begin{aligned} & \alpha_D \rho_D \left(\frac{\partial \mathbf{v}_D}{\partial t} + \mathbf{v}_D \cdot \nabla \mathbf{v}_D \right) \\ &= -\alpha_D \nabla p_C + \alpha_D \rho_C \frac{3}{8r_D} C_D |\mathbf{v}_C - \mathbf{v}_D| (\mathbf{v}_C - \mathbf{v}_D) \\ & \quad + \frac{1}{2} \alpha_D \rho_C \left[\frac{\partial \mathbf{v}_C}{\partial t} + \mathbf{v}_C \cdot \nabla \mathbf{v}_C - \left(\frac{\partial \mathbf{v}_D}{\partial t} + \mathbf{v}_D \cdot \nabla \mathbf{v}_D \right) \right] \\ & \quad - \frac{1}{2} \rho_C (\mathbf{v}_D - \mathbf{v}_C) \left[\frac{\partial \alpha_D}{\partial t} + \mathbf{v}_D \cdot \nabla \alpha_D + \alpha_D \nabla \cdot (\mathbf{v}_D - \mathbf{v}_C) \right] \end{aligned} \quad (7.7)$$

$$\begin{aligned} & \quad + \frac{1}{4} \alpha_D \rho_C (\mathbf{v}_D - \mathbf{v}_C) \times \nabla \times \mathbf{v}_D + \frac{1}{4} \alpha_D \rho_C (\mathbf{v}_D - \mathbf{v}_C) \times \nabla \times \mathbf{v}_C \\ & \quad - \frac{3}{8r_D} C_D |\mathbf{v}_C - \mathbf{v}_D| \frac{3}{20} \alpha_D \rho_C |\mathbf{v}_D - \mathbf{v}_C|^2 \nabla \alpha_D + \alpha_D \nabla \cdot (\beta \mu_C [\nabla \mathbf{v}_v (\nabla \mathbf{v}_v)^T]) \\ & \quad + \nabla \cdot (\alpha_D \mu_D^{\text{Re}} [\nabla \mathbf{v}_D + (\nabla \mathbf{v}_D)^T]) + \alpha_D \rho_D \mathbf{g}, \\ & \alpha_C \rho_C \left(\frac{\partial \mathbf{v}_C}{\partial t} + \mathbf{v}_C \cdot \nabla \mathbf{v}_C \right) \\ &= -\alpha_C \nabla p_C + \alpha_D \rho_C \frac{3}{8r_D} C_D |\mathbf{v}_C - \mathbf{v}_D| (\mathbf{v}_D - \mathbf{v}_C) \\ & \quad - \frac{1}{2} \alpha_D \rho_C \left[\frac{\partial \mathbf{v}_C}{\partial t} + \mathbf{v}_C \cdot \nabla \mathbf{v}_C - \left(\frac{\partial \mathbf{v}_D}{\partial t} + \mathbf{v}_D \cdot \nabla \mathbf{v}_D \right) \right] \\ & \quad + \frac{1}{2} \rho_C (\mathbf{v}_D - \mathbf{v}_C) \left[\frac{\partial \alpha_D}{\partial t} + \mathbf{v}_D \cdot \nabla \alpha_D + \alpha_D \nabla \cdot (\mathbf{v}_D - \mathbf{v}_C) \right] \end{aligned} \quad (7.8)$$

$$\begin{aligned} & \quad - \frac{1}{4} \alpha_D \rho_C (\mathbf{v}_D - \mathbf{v}_C) \times \nabla \times \mathbf{v}_D - \frac{1}{4} \alpha_D \rho_C (\mathbf{v}_D - \mathbf{v}_C) \times \nabla \times \mathbf{v}_C \\ & \quad + \frac{1}{2} \nabla \cdot \alpha_D \rho_C (\mathbf{v}_D - \mathbf{v}_C) (\mathbf{v}_D - \mathbf{v}_C) - \frac{1}{2} \alpha_D \rho_C (\mathbf{v}_D - \mathbf{v}_C) \cdot \nabla (\mathbf{v}_D - \mathbf{v}_C)^T \\ & \quad + \frac{1}{4} \rho_C |\mathbf{v}_C - \mathbf{v}_D|^2 \nabla \alpha_D + \frac{3}{8r_D} C_D |\mathbf{v}_C - \mathbf{v}_D| \frac{3}{20} \alpha_D \rho_C |\mathbf{v}_D - \mathbf{v}_C|^2 \nabla \alpha_D \\ & \quad + \nabla \cdot (\alpha_C \mu_C [\nabla \mathbf{v}_v (\nabla \mathbf{v}_v)^T]) + \nabla \cdot (\alpha_C \mu_C^{\text{Re}} [\nabla \mathbf{v}_C + (\nabla \mathbf{v}_C)^T]) + \alpha_C \rho_C \mathbf{g} \end{aligned}$$

mit $\mathbf{v}_v = \alpha_D \mathbf{v}_D + \alpha_C \mathbf{v}_C$.

Die Bewegungsgleichungen für die laminare Strömung einer niedrig konzentrierten Mischung folgen, indem man (7.5) und (7.6) addiert bzw. (7.7) und (7.8) addiert und die turbulenten Spannungen vernachlässigt. Die Ergebnisse sind

$$\nabla(\alpha_D \mathbf{v}_D + \alpha_C \mathbf{v}_C) = 0, \quad (7.9)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_C \rho_C \mathbf{v}_C + \alpha_D \rho_D \mathbf{v}_D) + \nabla \cdot \left(\alpha_C \rho_C \mathbf{v}_C \mathbf{v}_C + \alpha_D \rho_D \mathbf{v}_D \mathbf{v}_D + \frac{1}{2} \alpha_D \rho_C (\mathbf{v}_D - \mathbf{v}_C)(\mathbf{v}_D - \mathbf{v}_C) \right) \\ & = -\nabla(\alpha_C p_C + \alpha_D p_D) + \nabla \cdot ((\alpha_D \beta + \alpha_C) \mu_C [\nabla \mathbf{v}_v + (\nabla \mathbf{v}_v)^T]). \end{aligned} \quad (7.10)$$

Literaturverzeichnis

- [1] R. Aris, *Vectors, Tensors, and the Basic Equations of Fluid Mechanics*, Dover Publ. Inc., New York 1989.
- [2] S. Berres, R. Bürger, K.H. Karlsen and E.M. Tory, ‘Strongly degenerate parabolic-hyperbolic systems modeling polydisperse sedimentation with compression’, *SIAM J. Appl. Math.*, erscheint demnächst.
- [3] R. Bürger, W.L. Wendland and F. Concha, ‘Model equations for gravitational sedimentation-consolidation processes’, *Z. Angew. Math. Mech.* **80** (2000), 79–92.
- [4] M.C. Bustos, F. Concha, R. Bürger und E.M. Tory, *Sedimentation and Thickening*, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, Niederlande, 1999.
- [5] Y.A. Buyevich, ‘Statistical hydrodynamics of disperse systems. Physical background and general equations’, *J. Fluid Mech.* **49** (1971), 489–507.
- [6] F. Concha und E.R. Almendra, ‘Settling velocities of particulate systems. 1. Settling velocities of individual spherical particles’, *Int. J. Mineral Process.* **5** (1979), 349–367.
- [7] D.A. Drew und S.L. Passman, *Theory of Multicomponent Fluids*, Springer-Verlag, New York 1999.
- [8] M.E. Gurtin, *An Introduction to Continuum Mechanics*, Academic Press, San Diego 1981.
- [9] M. Ishii, *Thermo-Fluid Dynamic Theory of Two-Phase Flow*, Eyrolles, Paris 1975.
- [10] M. Ishii und N. Zuber, ‘Drag coefficient and relative velocity in bubbly, droplet or particulate flows’, *AIChE J.* **25** (1979), 843–855.
- [11] D.D. Joseph und T.S. Lundgren, ‘Ensemble averaged and mixture theory equations for incompressible fluid-particle suspensions’, *Int. J. Multiphase Flow* **16** (1990), 35–42.
- [12] I-S. Liu, *Continuum Mechanics*, Springer-Verlag, Berlin 2002.
- [13] R.I. Nigmatulin, ‘Spatial averaging in the mechanics of heterogeneous and dispersed systems’, *Int. J. Multiphase Flow* **5** (1979), 353–385.
- [14] C. Truesdell, *Rational Thermodynamics*, Springer-Verlag, New York 1984.
- [15] C. Truesdell und R. Toupin, ‘The classical Field Theories’. In: S. Flügge (Hg.), *Handbuch der Physik*, Vol. III, Teil 3, Springer-Verlag, Berlin, 1960.
- [16] N. Zuber, ‘On the dispersed two-phase flow in the laminar flow regime’, *Chem. Eng. Sci.* **19** (1964), 897–917.

R. Bürger
Pfaffenwaldring 57
70569 Stuttgart
Germany
E-Mail: buerger@mathematik.uni-stuttgart.de