ROCZNIKI INŻYNIERII BUDOWLANEJ – ZESZYT 8/2008
Komisja Inżynierii Budowlanej Oddział Polskiej Akademii Nauk w Katowicach

TERMODYFUZJA GRADIENTOWA W WIELOSKLADNIKOWYM CIELE ODKSZTAŁCALNYM

Jan Kubik
Politechnika Opolska, Opole

1. Wprowadzenie

Teorie gradientowe stosujemy w przypadkach znacznych zmian pól mechanicznych, kiedy do opisów ich zmian trzeba użyć wyższych gradientów wielkości polowych. Przypadki te to materiały kompozytowe, biologiczne oraz typowe materiały kapilarno-porowate. W materiałach tych na granicy faz występują znaczne zmiany naprężeń oraz odkształceń. Sprawa komplikuje się w przypadku typowych materiałów budowlanych jak beton, ceramika, grunt, kiedy to szkielet w fazie stałej sąsiaduje z cienkimi warstwami cieczy. Opis sił występujących w cienkich filmach cieczy zwilżających powierzchnię ciała stałego nastręcza wiele trudności wynikających z nieciągłości faz ośrodka. Szansę na pokonanie tych trudności daje gradientowa teoria ośrodka wieloskładnikowego.

2. Bilanse masy

W teorii mieszanin zakłada się, iż każdy ze składników posiada parcjalną gęstość i prędkość składnika. Spełniony jest też parcjalny bilans masy, w którym uwzględnia się wpływ źródła ρR^{α} i przepływów masy. Bilanse te mają formę

$$\frac{\partial \rho^{\alpha}}{\partial t}+\left(\rho^{\alpha} v_i^{\alpha}\right)_{,i}=\rho R^{\alpha} \quad \text{lub} \quad \rho \frac{d c^{\alpha}}{d t}+\left(\rho^{\alpha} v_i^{\alpha}\right)_{,i}=\rho R^{\alpha}, \tag{1}$$

gdzie:

$$c^{\alpha}=\frac{\rho^{\alpha}}{\rho}, \ \alpha=0,1,\ldots,n .$$

Po zsumowaniu otrzymamy zasadę zachowania masy

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}+(\rho w_i)_{,i}=0, \tag{2}$$

gdzie: $\rho = \sum_{\alpha} \rho^{\alpha}$, $v_i^{\alpha} = w_i + u_i^{\alpha}$, $j_i^{\alpha} = \rho^{\alpha} u_i^{\alpha}$.

Bilanse masy nie wprowadzają więc nowych elementów do teorii gradientowej.

3. Równania pędu

Będziemy analizowali proces deformacji, gdzie oprócz klasycznego tensora odkształceń $2\varepsilon_{ij} = u_{i,j} + u_{j,i}$ wystąpią jeszcze jego gradienty $\varepsilon_{ij,k} = \eta_{ijk}$ $(d\varepsilon_{ij} = \frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial x_k} dx_k)$. Analogicznie z tensorem naprężeń σ_{ij} analizuje się gradient τ_{ijk} dodatkowych napięć.

Parcjalny bilans pędu ma formę klasyczną, przy zmienionym wektorze naprężeń P_i^{α}

$$\frac{d}{dt}\int_{v} \rho^{\alpha} v_i^{\alpha} \, dV = \int_{v} (\rho^{\alpha} F_i^{\alpha} + \phi_i^{\alpha}) \, dV + \int_{A} \tilde{P}_i^{\alpha} \, dA \, , \; \tilde{P}_i^{\alpha} = (\sigma_{ij}^{\alpha} + \tau_{ijk,k}^{\alpha}) n_j F \, . \tag{3}$$

Po zsumowaniu bilansów parcjalnych otrzymamy bilans pędu:

$$\sum_{\alpha} \frac{d}{dt}\int_{v} \rho^{\alpha} v_i^{\alpha} \, dV = \sum_{\alpha}\int_{v} (\rho^{\alpha} F_i^{\alpha} + \phi_i^{\alpha}) \, dV + \sum_{\alpha}\int_{A} \tilde{P}_i^{\alpha} dA \, , \; \tilde{P}_i = (\sigma_{ij} + \tau_{ijk,k}) n_j \, . \tag{4}$$

Stąd otrzymamy lokalną formę bilansu – równania ruchu

$$\rho \frac{dv_i}{dt} = \rho F_i + \sum_{\alpha} (\sigma_{ij}^{\alpha} + \rho^{\alpha} u_i^{\alpha} u_j^{\alpha} + \tau_{ijk,k}^{\alpha})_{,j} \; \rightarrow \; \rho \frac{dv_i}{dt} = \rho F_i + (\sigma_{ij} + \tau_{ijk,k})_{,j} \, , \tag{5}$$

gdzie:

$$\sum_{\alpha} \rho^{\alpha} u_i^{\alpha} u_j^{\alpha} \approx 0 \, , \; \sum_{\alpha} \phi_i^{\alpha} = 0 \, ,$$

która jest formalnie podobna do klasycznych ujęć mechaniki ośrodka jednoskładnikowego. W przeprowadzonych rozważaniach wykorzystano koncepcję przepływu mieszaniny z wyróżnionym składnikiem, w której gęstość ρ_0 jest o rząd większa od gęstości pozostałych składników. W wyniku takiego przyjęcia otrzymamy równania termodyfuzji w ciele stałym.

4. Bilanse energii

Zgodnie z klasyczną procedurą równanie ruchu (5) mnożymy przez wektor prędkości przemieszczenia v_i i całkujemy po objętości ośrodka

$$\int_v [(\sigma_{ij} + \tau_{ijk,k})_{,j} + \rho (F_i - \frac{d v_i}{d t})] v_i \, dV = 0$$

$$\int_v [(\sigma_{ij} v_i)_{,j} - (\sigma_{ij} v_{i,j}) + (\tau_{ijk,k} v_i)_{,j} - (\tau_{ijk,k} v_{i,j}) + \rho F_i v_i - \rho \frac{d v_i}{d t} v_i] dV = 0 \tag{6}$$

Następnie po przekształceniach będzie

$$\int_A (\sigma_{ij} + \tau_{ijk,k}) v_i n_j \, dA - \int_v \sigma_{ij} d_{ij} \, dV - \int_A (\tau_{ijk} v_{i,j}) n_k \, dA + \int_v \tau_{ijk} v_{i,jk} \, dV +$$

$$+ \int_v \rho F_i v_i \, dV - \frac{d}{dt} \int_v \rho \frac{v_i v_i}{2} dV = 0. \tag{7}$$

Otrzymamy stąd równania bilansu energii mechanicznej w ośrodku

$$\frac{d}{dt} \int_v \rho (U + \tilde{U} + K) \, dV = \int_v \rho F_i v_i \, dV + \int_A \tilde{P}_i v_i \, dA - \int_A (\tau_{ijk} v_{i,j}) n_k \, dA . \tag{8}$$

Lokalna forma bilansu energii przyjmie postać

$$\rho \frac{d}{d t} (U + \tilde{U}) = \sigma_{ij} d_{ij} - \tau_{ijk} v_{i,jk} , \tag{9}$$

natomiast po uwzględnieniu źródła ρ_i i strumienia ciepła q_i będzie

$$\rho \frac{d}{d t} (U + \tilde{U}) = \rho r - q_{i,i} + \sigma_{ij} d_{ij} - \tau_{ijk} v_{i,jk} . \tag{10}$$

W przypadku ośrodka wieloskładnikowego bilans energii przyjmie formę

$$\sum_\alpha \int_v \rho^\alpha (U^\alpha + \tilde{U}^\alpha + K^\alpha) dV =$$

$$= \sum_\alpha \int_v (\rho^\alpha r^\alpha + \rho^\alpha F_i^\alpha v_i^\alpha + E^\alpha) dV + \sum_\alpha \int_A \tilde{P}_i^\alpha v_i^\alpha dA - \sum_\alpha \int_A (\tau_{ijk}^\alpha v_{i,j}^\alpha) n_k dA. \tag{11}$$

Po przekształceniach otrzymamy:

$$\rho \frac{d}{dt} (U + \tilde{U}) = \rho r - q_{i,i} + \sigma_{ij} d_{ij} - \tau_{ijk} v_{i,jk} + \sum_\alpha \rho^\alpha \frac{dc^\alpha}{dt} M^\alpha - \rho R^\alpha M^\alpha - j_i^\alpha M_{,i}^\alpha . \tag{12}$$

Uwzględniając klasyczną formę nierówności wzrostu entropii otrzymamy nierówność rezydualną w teorii gradientowej

$$-\rho\frac{d}{dt}(U+\tilde{U})+\rho\frac{dS}{dt}T+\sigma_{ij}\,d_{ij}-\tau_{ijk}\,v_{i,jk}-q_i\,\frac{T_{,i}}{T}+ \\ +\sum_{\alpha}\rho^{\alpha}\,\frac{dc^{\alpha}}{dt}M^{\alpha}-\rho R^{\alpha}M^{\alpha}-j_i^{\alpha}M_{,i}^{\alpha}\geq 0, \tag{13}$$

a po linearyzacji $(\theta=T-T_0)$ będzie

$$-\rho(\dot{U}+\dot{\tilde{U}})-\rho\,S\,\theta+\sigma_{ij}\,\dot{\varepsilon}_{ij}-\tau_{ijk}\,\dot{u}_{i,jk}-q_i\,\frac{\Theta_{,i}}{T}+\sum_{\alpha}\rho c^{\alpha}M^{\alpha}-\rho R^{\alpha}M^{\alpha}-j_i^{\alpha}M_{,i}^{\alpha}\geq 0\,. \tag{14}$$

Z nierówności (14) wynika, że energia wewnętrzna $\rho(U+\tilde{U})=\rho U\,(S,\varepsilon_{ij},u_{i,jk},c^{\alpha})$ zależy od entropii S, odkształceń ε_{ij} gradientu odkształceń $u_{i,jk}$ i stężeń c^{α}.

5. Równania konstytutywne

Energię swobodną $A(\varepsilon_{ij},\eta_{ijk},\Theta,c^{\alpha})$ zależną od odkształceń ε_{ij} i jego gradientów η_{ijk} oraz temperatury Θ i stężeń c^{α} przedstawimy w postaci formy liniowej i kwadratowej

$$\rho A(\varepsilon_{ij},\eta_{ijk},\Theta,c^{\alpha})=\rho A_0+h_{ij}\,\varepsilon_{ij}+h_{ijk}\,\eta_{ijk}+a\Theta+b^{\alpha}c^{\alpha}+ \\ +\frac{1}{2}E_{ijkl}\,\varepsilon_{ij}\,\varepsilon_{kl}+e_{ijklm}\,\varepsilon_{ij}\eta_{klm}+\frac{1}{2}G_{ijklmn}\eta_{ijk}\,\eta_{lmn}+\frac{1}{2}c_v\Theta^2-a_{ij}\Theta\varepsilon_{ij}+ \\ +A_{ijk}\Theta\eta_{ijk}+b^{\alpha}\Theta c^{\alpha}+\frac{1}{2}d(c^{\alpha})^2-b_{ij}^{\alpha}c^{\alpha}\varepsilon_{ij}+\beta_{ijk}^{\alpha}c^{\alpha}\eta_{ijk}\,. \tag{15}$$

Otrzymamy stąd równania tworzące na naprężenia σ_{ij}, τ_{ijk} entropię ρS i potencjał chemiczny M^{α}:

$$\sigma_{ij}=\frac{\partial A}{\partial\varepsilon_{ij}}=h_{ij}+E_{ijkl}\,\varepsilon_{kl}+e_{ijk,\mathrm{ln}}\,\eta_{k,\mathrm{ln}}-a_{ij}\Theta-b_{ij}^{\alpha}c^{\alpha}\,, \tag{16}$$

$$\tau_{ijk}=\frac{\partial A}{\partial\eta_{ijk}}=h_{ijk}+e_{ijk,\mathrm{ln}}\,\varepsilon_{\mathrm{ln}}+G_{ijk\,\mathrm{ln},m}\,\eta_{\mathrm{ln},m}-A_{ijk}\Theta-\beta_{ijk}^{\alpha}c^{\alpha}\,, \tag{17}$$

$$-\rho\,S\equiv\frac{\partial A}{\partial\Theta}=a+c_v\Theta-a_{ij}\varepsilon_{ij}-A_{ijk}\eta_{ijk}+l^{\alpha}c^{\alpha}\,, \tag{18}$$

$$M^{\alpha}=\frac{\partial A}{\partial c^{\alpha}}=b+d^{\alpha}c^{\alpha}+l^{\alpha}\Theta-b_{ij}^{\alpha}\varepsilon_{ij}-\beta_{ijk}^{\alpha}\eta_{ijk} \tag{19}$$

oraz klasyczne równania na strumienie ciepła q_i i masy j_i^k :

$$q_i = -\lambda_{ij}\Theta_{,j}\,,\;\; j_i^{\alpha} = -K_{ij}^{\alpha}\, M_{,j}^{\alpha}\,. \tag{20}$$

Z równań tych otrzymamy równania termodyfuzji gradientowej:

$$\begin{gathered}\rho\frac{dv_i}{dt} = \rho F_i + (E_{ijkl}\,u_{k,l} + e_{ijk,\ln}\,u_{k,\ln} + e_{ijk\ln}\,u_{l,nk} + G_{ijk\ln m}\,u_{l,nmk})_{,j} + \\ - a_{ij}\Theta_{,j} - b_{ij}^{\alpha}c_{,j}^{\alpha} - A_{ijk}\Theta_{,jk} - \beta_{ijk}^{\alpha}c_{,jk}^{\alpha}\end{gathered} \tag{21}$$

$$\rho T_0(c_v\dot{\Theta} - a_{ij}\dot{u}_{i,j} - A_{ijk}\dot{u}_{i,jk} + L^{\alpha}c^{\alpha}) = \rho r + (\lambda_{ij}\Theta_{,j})_{,i}\,, \tag{22}$$

$$\rho\dot{c}^{\alpha} = \rho R^{\alpha} + K_{ij}^{\alpha}(d^{\alpha}c_{,j}^{\alpha} + l^{\alpha}\Theta_{,j} - b_{kl}^{\alpha}\,u_{k,lj} - \beta_{nrl}^{\alpha}\;u_{l,rlj})_{,i}\,. \tag{23}$$

Do równań tych należy dołączyć warunki początkowo-brzegowe części mechanicznej, cieplnej i dyfuzyjnej.

Oznaczenie symboli

ρ_i – gęstość, density,
σ_{ij} – tensor naprężeń klasycznych, classical stress tensor,
τ_{ijk} – tensor naprężeń gradientowych, gradiental stress tensor,
u_i – wektor przemieszczeń, displacement vector,
v_i – wektor prędkości, velocity vector,
ε_{ij} – tensor odkształceń klasycznych, classical strain tensor,
η_{ijk} – tensor odkształceń gradientowych, gradiental strain tensor
ρF_i – siła masowa, body force,
P_i – siła powierzchniowa, surface force,
ρS – entropia, entropy,
ρr – źródło ciepła, heat source,
q_i – strumień masy, heat flux,
c^{α} – stężenie, concentration,
M^{α} – potencjał chemiczny, chemical potential,
a , a_{ij} , A_{ijk} , b , b_{ij}^{α} – stałe materiałowe, material constant.

Literatura

[1] Kubik J.: Thermodiffusion flows in a solid with a dominant constituent, IFM 44, Ruhr Universität Bochum 1985.
[2] Kubik J.: Elementy termomechaniki, OW PO Opole 2004.
[3] Nowacki W.: Termodyfuzja w ciałach stałych, PWN 1991.

THE GRADIENT THEORY OF THERMODIFFUSION IN MULTICOMPONENT DEFORMABLE SOLIDS

Summary

In the paper, thermodiffusion viscoelastic equation, which in addition to stress and strain tensors appear in their gradients, are given. This type of theory describes the changes of stress fields in the neighborhood of the coast or interfacial border. Starting point for these considerations are the equations of the mixtures theory, which as a result of border crossing, we get the equation of gradient thermodiffusion.