УДК 539.3
DOI 10.33113/mkmk.ras.2020.26.04.513_527.06

ВАРИАЦИОННАЯ ПОСТАНОВКА СВЯЗАННОЙ ЗАДАЧИ ТЕПЛОМАССОПЕРЕНОСА И ТЕРМОУПРУГОСТИ*

Белов П.А., Лурье С.А.

ФГБУН Институт прикладной механики РАН, г. Москва, Россия

АННОТАЦИЯ

Дана вариационная формулировка связанной системы уравнений термоупругости, тепло- и массообмена. Предлагается частный случай градиентной модели среды Миндлина-Тупина, когда градиентная составляющая потенциальной энергии зависит только от градиентов стесненной дилатации. В целом же рассматривается вариационная обобщенная модель, в которой градиентная вариационная модель расширяется за счет учета потенциальной энергии дефектных сред с дилатационной поврежденностью, объединяющая два типа свободных (несовместных) дилатаций: свободных дилатаций, связанных с изменением объема из-за температурных воздействий, и свободных дилатаций, связанных с концентрацией примеси вследствие процессов диффузии. В результате уравнения движения, входящие в связанную систему уравнений, являются частным случаем градиентной теории (дилатационной модели) в части дифференциального оператора над перемещениями. Уравнения тепло- и массообмена имеют одинаковую структуру и отражают диффузионно-волновой механизм эволюции в сплошной среде температуры и примеси. Установлено, что связанная система уравнений распадается на три независимые краевые задачи относительно перемещений, свободного (несовместного) изменением объема, связанного с температурным нагружением, и свободным (несовместным) изменением объема, связанным с процессом диффузии (концентрации), когда тензоры физических свойств являются шаровыми и соответствующие коэффициенты связности равны нулю. Уравнения совместности, полученные из обобщенных уравнений закона Гука для силовых факторов и их потоков путем исключения кинематических переменных, дают целый спектр законов теплопроводности, диффузии и термоупругости, включая законы Фурье, Максвелла-Каттанео, Соре и Дюфура.

Ключевые слова: принцип возможной работы; линейная вариационная форма; диссипативные процессы; закон Фурье; закон Максвелла-Каттанео; гиперболические модели тепло/массопереноса; закон Соре; закон Дюфура

VARIATIONAL FORMULATION OF COUPLED OF HEAT/MASS TRANSFER AND THERMOELASTICITY PROBLEM

Belov P.A., Lurie S.A.

Institute of Applied Mechanics of Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia

---

* *Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ (№18-01-00553-а) и частичной финансовой поддержке Программы фундаментальных исследований ИПРИМ РАН (номер гос. регистрации АААА-А19-119012290177-0).*

ABSTRACT

A variational formulation of a coupled system of equations of thermoelasticity, heat and mass transfer is given. A special case of the gradient model of the Mindlin-Tupin medium is proposed, when the gradient component of the potential energy depends only on the gradients of the constrained dilation. In general, a generalized variational model is considered, in which the gradient variational model is expanded by taking into account the potential energy of defective media with dilatational damage, combining two types of free (incompatible) dilations: free dilations associated with a change in volume due to temperature effects, and free dilations associated with the concentration of impurities due to diffusion processes. As a result, the equations of motion included in the coupled system of equations are a special case of the gradient theory (dilation model) in the part of the differential operator over displacements. The heat and mass transfer equations have the same structure and reflect the diffusion-wave mechanism of evolution in a continuous medium of temperature and impurity. It was found that the coupled system of equations decomposes into three independent boundary value problems with respect to displacements, a free (incompatible) change in volume associated with temperature loading, and a free (incompatible) change in volume associated with the diffusion (concentration) process, when the tensors of physical properties are spherical and the corresponding connectivity coefficients are equal to zero. The consistency equations obtained from the generalized equations of Hooke's law for force factors and their fluxes by eliminating kinematic variables give a whole spectrum of laws of heat conduction, diffusion and thermoelasticity, including the laws of Fourier, Maxwell-Cattaneo, Soret and Dufour.

Keywords: principle of possible work; linear variational form; dissipative processes; Fourier's law; Maxwell-Cattaneo's law; hyperbolic heat/mass transfer models; Soret's law; Dufour's law

ВВЕДЕНИЕ

Связные процессы деформирования сред с учетом тепломассопереноса являются предметом колоссального интереса в научном мире в последние годы в связи с актуальностью для реальных приложений: проектирования специальных компонентов устройств хранения и передачи энергии, моделирования и производства компонентов фармацевтической и пищевой промышленности, процессов очистки расплавленных металлов под действием магнитного поля, модификации поверхностей металлов, процессов экструзии полимеров, моделирования процессов, реализуемых в мембранных технологиях, моделирования процессов течения жидкости на микро- и наноразмерных уровнях в пористых системах и пр. [1]. Особенности этих процессов связаны с существенной их зависимостью от условий теплового нагружения и концентрации, их градиентов и скоростей.

В связи с большим количеством исследований в области связных процессов теплопереноса с учетом механических полей отметим несколько недавних монографий, где приводятся обзор и анализ подобных моделей, дается их обсуждение и сравнение [2-4].

Согласно уравнениям необратимой термодинамики температурные градиенты могут управлять как тепловым потоком, так и массовым потоком (диффузией). Этот эффект известен как термодиффузия или эффект Соре. Возможно и обратное, т.е. градиенты химического потенциала могут управлять потоком тепла, известным как диффузионный термоэффект или эффект Дюфура. В реальных системах, в которых градиенты температуры и градиенты химического потенциала возникают вместе, тепловая диффузия может вносить значительный вклад в общий поток. В работе [2] утверждается, что коэффициенты переноса, описывающие эти связанные явления, могут быть рассчитаны для объемных жидких смесей с использованием формализма Грина-Кубо, ссылки на который имеются в работе [2] или могут быть рассчитаны более эффективно с использованием методов MD.

Изучение связных процессов тепломассопереноса оказалось важным и для медицины в связи с разработкой и синтезом безопасных наноматериалов, включая полимерные наноматериалы, дендримеры, наночастицы, углеродные нанотрубки и квантовые точки для эффективной загрузки и контролируемого высвобождения лекарств [5].

Комбинированное воздействие тепла и массы обычно приводит к явлению перекрестной диффузии. При этом происходит изменение концентрации, вызванное температурным градиентом (эффект Соре или термодиффузионный эффект), и изменение тепловой энергии из-за градиента концентрации (эффекты Дюфура или диффузионные термоэффекты). Замечено, что в целом эти эффекты имеют меньший порядок по сравнению с эффектами, обусловленными Законами Фурье и Фика. Однако эффекты связности могут проявляться в системах, где градиенты концентраций и температур могут быть значительными, в частности, в сильно неоднородных системах с микро- и наноструктурой. Существенным представляется и учет возможной связности тепломассопереноса и с механическими полями. Например, в [6] авторы обсуждали ньютоновский нагрев, термодиффузию и диффузионно-термоэффекты в осесимметричном потоке жидкости вдоль растягивающейся стенки. В работе [7] на основе термодинамики необратимых процессов рассматриваются связность процессов термодиффузии с полями напряжений. Интересные исследования процессов тепломассопереноса в деформируемых телах и неоднородных структурах приводятся в работах [8-12]. Вариационные модели рассматривались в работе [13] для описания взаимосвязи между процессами деформации, диффузии и тепла. Интересные результаты получены в работе [14], где показано, что в процессах тепломассопереноса необходимо учитывать особенности структуры, которые проявляются через различные перекрестные эффекты. Перекрестные эффекты связной термодиффузии и механических полей напряжений учитывались в [15] при моделировании обработки поверхности заряженными частицами Установлено, что возникающие механические возмущения влияют на структурные изменения, фазовые переходы и характер диффузии. Следовательно, при моделировании необходимо учитывать взаимосвязь между различными процессами [16]. В работе [17] показано, что взаимосвязь механических и диффузионных волн приводит к искажению профиля волны деформации (и напряжения), а распределение концентрации не соответствует чистому диффузионному процессу.

Приведенный краткий анализ, несомненно, не является полным, но показывает важность исследования связных эффектов в механике деформируемых сред, особенно для неоднородных структур. Актуальными являются и проблемы моделирования таких перекрестных процессов с использованием строгих подходов.

В данной работе развивается предложенный авторами вариационный подход [18-21] к описанию связных, в общем случае необратимых, процессов термоупругости, теплопроводности и диффузии. Показано, что этот подход позволяет обосновать достаточно широкое обобщение связных процессов эластодиффузии и теплопроводности и указать соотношения для описания эффектов Соре и Дюфура и в случае проявления волновых свойств тепломассопереноса (гиперболические диффузия и теплоперенос).

1. КИНЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Кинематическая модель непрерывной среды в градиентной теории Тупина определяется вектором перемещений R_i, тензором дисторсии второго ранга $R_{i,j}$ и тензором кривизн третьего ранга $R_{i,jk}$. Из тензора дисторсии можно выделить шаровой, девиатор и антисимметричный. Для простоты будем полагать, что девиаторная и антисимметричная часть не будут аргументами в вариационном принципе, который будет сформулирован ниже. И, наоборот, кинематическая модель будет содержать вектор перемещений R_i, вектор градиента изменения объёма $R_{m,mi}$ и скаляр изменения объёма $\theta = R_{m,m}$. Далее, следуя Миндлину, дополним список кинематических переменных двумя скалярами и их градиентами, которые имеют смысл несовместных полей деформации изменения объёма, связных с тепловыми и диффузионными процессами, сопровождающими процесс деформирования. Все три дилатации (совместную и две несовместные) будем определять с помощью верхнего индекса.

Обозначим совместное изменение объема, которое связано с дивергенцией перемещений за θ^1

$$\theta^1 = R_{m,m}. \tag{1}$$

Тепловые процессы описываются свободной (несовместной) деформацией изменения объёма θ^2, которой как выяснится позже, в частном случае распадающейся системы, можно придать смысл температурного изменения объема.

Диффузионные процессы описываются свободной дилатацией θ^3

$$\theta^3 = c, \tag{2}$$

которой как показано в дальнейшем в частном случае распадающейся системы, можно придать смысл концентрации примеси. В результате, список в вариационном принципе содержит три скаляра θ^a, и один вектор R_i. В дальнейшем будем пользоваться формальным трехмерным конфигурационным пространством, определяемым полем совместных дисторсий θ^1, свободной (несовместной) деформацией изменения объёма θ^2 и свободной дилатацией θ^3, связанной с диффузионными процессами. Для этого конфигурационного пространства можно ввести и соответствующий базис $e^a = \left\{ e^1, e^2, e^3 \right\}$.

2. ВАРИАЦИОННАЯ ФОРМУЛИРОВКА

Диссипативные процессы можно описать с помощью обобщенного вариационного принципа Седова Л.И., в соответствии с которым вариационное уравнение определяется суммой вариации лагранжиана обратимых процессов и «каналами диссипации», которые являются простейшими неинтегрируемыми линейными формами пары вариаций аргументов, входящих множителями в билинейные слагаемые лагранжиана. В результате был сформулирован принцип стационарности неинтегрируемой линейной вариационной формы, являющейся суммой вариации лагранжиана обратимой части и совокупности «каналов диссипации», простейших неинтегрируемых линейных форм, каждая из которых содержит только одну пару вариаций кинематических переменных.

Поэтому построение теории можно разделить на две части: формулировку лагранжиана обратимой части и формулировку каналов диссипации.

Постулируем лагранжиан в следующем виде

$$L = A + K - U, \tag{3}$$

$$A = \int_{t_0}^{t}\int_{V} P_i^V R_i dVdt + \int_{t_0}^{t}\int_{F} P_i^F R_i dFdt, \tag{4}$$

$$U = \int_{t_0}^{t}\int_{V} U_V dVdt = \frac{1}{2}\int_{t_0}^{t}\int_{V}\left(G_{ijmn} R_{i,j} R_{m,n} + A^{ab}\theta^a\theta^b + C^{ab}\theta^a_{,i}\theta^b_{,i}\right)dVdt, \tag{5}$$

$$K = \int_{t_0}^{t}\int_{V} K_V dVdt = \frac{1}{2}\int_{t_0}^{t}\int_{V}\left(\rho\dot{R}_i\dot{R}_i + \rho^{ab}\dot{\theta}^a\dot{\theta}^b\right)dVdt. \tag{6}$$

Здесь и в дальнейшем верхние индексы пробегают значения: $a,\, b = 1,\, 2, 3$.

A – работа внешних объёмных P_i^V и поверхностных P_i^F сил на перемещениях R_i . U – потенциальная энергия, C_{ijmn} – классический тензор модулей упругости, представленный в виде разложения по двум базисным тензорам четвертого ранга $\delta_{ij}\delta_{mn}$ и $\left(\delta_{im}\delta_{jn}/2 + \delta_{in}\delta_{jm}/2 - \delta_{ij}\delta_{mn}/3\right)$

$$C_{ijmn} = G_{ijmn} + A^{11}\delta_{ij}\delta_{mn}/3 \quad G_{ijmn} = 2\mu\left(\delta_{im}\delta_{jn}/2 + \delta_{in}\delta_{jm}/2 - \delta_{ij}\delta_{mn}/3\right)$$

A^{ab}, C^{ab} – тензоры модулей второго ранга в трехмерном конфигурационном пространстве дилатаций. K – кинетическая энергия исследуемой дефектной среды, ρ – классическая плотность среды, ρ^{ab} – тензор мер инертности в трехмерном конфигурационном пространстве дилатаций.

В дальнейшем, в целях упрощения, будем считать, что кинетическая энергия пренебрежимо мала по сравнению с работой внешних сил. U_V и K_V – соответствующие плотности потенциальной и кинетической энергии.

Определим силовую модель в рамках обратимой модели. В соответствии с формулами Грина, определим механические напряжения σ_{ij}

$$\sigma_{ij} = \frac{\partial U_V}{\partial R_{i,j}} = G_{ijmn} R_{m,n} + A^{1b}\theta^b\delta_{ij}/3. \tag{7}$$

Отсюда следует

$$\sigma^1 = \sigma_{ij}\delta_{ij} = A^{1b}\theta^b. \tag{8}$$

В соответствии с формулами Грина, определим остальные компоненты вектора давлений σ^a в конфигурационном пространстве дилатаций

$$\sigma^a = \frac{\partial U_V}{\partial\theta^a} = A^{ab}\theta^b$$

$$\begin{cases} \sigma^1 = A^{1b}\theta^b = p \\ \sigma^2 = A^{2b}\theta^b = T \\ \sigma^3 = A^{3b}\theta^b = \pi \end{cases} \tag{9}$$

В случае, когда тензор A^{ab} имеет ненулевыми только диагональные компоненты, можно дать следующие трактовки скалярным силовым факторам: σ^1 – как давление p, σ^2 – как температуры T, а σ^3 как осмотическое давление π. Заметим, что выражая из (9) θ^2 через температуру, можно получить обобщение закона Дюамеля-Неймана с учетом диффузии.

В соответствии с формулами Грина, в конфигурационном пространстве дилатаций определим компоненты вектора «скалярных импульсов» I^a

$$I^a = \frac{\partial K_V}{\partial \dot{\theta}^a} = \rho^{ab}\dot{\theta}^b \tag{10}$$

и компоненты вектора «потоков» q^a

$$q_i^a = \frac{\partial U_V}{\partial \theta_{,i}^a} = C^{ab}\theta_{,i}^b. \tag{11}$$

Так как и обратимая, и необратимые модели содержат один и тот же набор кинематических переменных, силовые модели в обратимых и необратимых процессах строятся одновременно. Сформулируем сначала необходимые условия существования обратимых процессов для работы внутренних силовых факторов

$$\int_{t_0}^{t}\int_V \left(\sigma^a\delta\theta^a + I^a\delta\dot{\theta}^a\right)dVdt:$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \sigma^a}{\partial \theta^b} - \dfrac{\partial \sigma^b}{\partial \theta^a} = 0 \\ \dfrac{\partial \sigma^a}{\partial \dot{\theta}^b} - \dfrac{\partial I^b}{\partial \theta^a} = 0 \end{cases} \qquad \begin{cases} \dfrac{\partial I^a}{\partial \theta^b} - \dfrac{\partial \sigma^b}{\partial \dot{\theta}^a} = 0 \\ \dfrac{\partial I^a}{\partial \dot{\theta}^b} - \dfrac{\partial I^b}{\partial \dot{\theta}^a} = 0 \end{cases} \tag{12}$$

Из (12) следуют определения в общем случае непостоянных и даже нелинейных тензоров модулей $A_1^{ab}, A_2^{ab}, A_3^{ab}, A_4^{ab}$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \sigma^a}{\partial \theta^b} = \dfrac{\partial \sigma^b}{\partial \theta^a} = A_1^{ab} \\ \dfrac{\partial \sigma^a}{\partial \dot{\theta}^b} = \dfrac{\partial I^b}{\partial \theta^a} = A_2^{ab} \end{cases} \qquad \begin{cases} \dfrac{\partial I^a}{\partial \theta^b} = \dfrac{\partial \sigma^b}{\partial \dot{\theta}^a} = A_3^{ab} \\ \dfrac{\partial I^a}{\partial \dot{\theta}^b} = \dfrac{\partial I^b}{\partial \dot{\theta}^a} = A_4^{ab} \end{cases} \tag{13}$$

Исключая из (13) формально производные от силовых факторов, получим свойства тензоров обратимых свойств

$$\begin{cases} A_1^{ab} = A_1^{ba} \\ A_2^{ab} = A_3^{ba} = A^{ab} \\ A_4^{ab} = A_4^{ba} \end{cases} \tag{14}$$

Из (14) следует, что тензоры A_1^{ab}, A_4^{ab} – симметричны при перестановке верхних индексов, а тензоры A_2^{ab}, A_3^{ba} выражаются через один и тот же тензор A^{ab}, не имеющий никакой симметрии.

Рассмотрим необратимые процессы. В этом случае правые части соотношений (12) являются ненулевыми тензорами второго ранга. В результате можно записать необходимые условиями существования диссипативных процессов

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \sigma^a}{\partial \theta^b} - \dfrac{\partial \sigma^b}{\partial \theta^a} = 2B_1^{ab} \\ \dfrac{\partial \sigma^a}{\partial \dot{\theta}^b} - \dfrac{\partial I^b}{\partial \theta^a} = 2B_2^{ab} \end{cases} \qquad \begin{cases} \dfrac{\partial I^a}{\partial \theta^b} - \dfrac{\partial \sigma^b}{\partial \dot{\theta}^a} = 2B_3^{ab} \\ \dfrac{\partial I^a}{\partial \dot{\theta}^b} - \dfrac{\partial I^b}{\partial \dot{\theta}^a} = 2B_4^{ab} \end{cases} \tag{15}$$

В общем случае, когда одновременно есть и обратимые и необратимые процессы, нелинейные тензоры модулей определяются как суммы тензоров модулей обратимых и диссипативных свойств

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \sigma^a}{\partial \theta^b} = A_1^{ab} + B_1^{ab} \\ \dfrac{\partial \sigma^a}{\partial \dot{\theta}^b} = A^{ab} + B_2^{ab} \end{cases} \begin{cases} \dfrac{\partial I^a}{\partial \theta^b} = A^{ab} + B_3^{ab} \\ \dfrac{\partial I^a}{\partial \dot{\theta}^b} = A_4^{ab} + B_4^{ab} \end{cases} \tag{16}$$

Подставляя (16) в (15), и используя свойство симметрии тензоров модулей обратимых свойств (14), получим свойства нелинейных тензоров модулей диссипативных свойств

$$\begin{cases} B_1^{ba} = -B_1^{ab} \\ B_3^{ba} = -B_2^{ab} = -B^{ab} \end{cases} \qquad \begin{cases} B_2^{ba} = -B_3^{ab} = B^{ba} \\ B_4^{ba} = -B_4^{ab} \end{cases} \tag{17}$$

Из (17) следует, что тензоры B_1^{ab}, B_4^{ab} – антисимметричны при перестановке верхних индексов, а тензоры B_2^{ab}, B_3^{ab} выражаются через один и тот же тензор B^{ab}, не имеющий никакой симметрии. Т.е. от тензоров B_2^{ab}, B_3^{ab} не требуется никаких условий симметрии по парам индексов.

При гипотезе физической линейности теории, тензоры модулей не должны зависеть от кинематических переменных. Тогда уравнения обобщенного закона Гука при наличии диссипативных процессов для обобщенных давлений σ^a и обобщенных «скалярных импульсов» I^a можно получить из (16), проинтегрировав их в квадратурах

$$\begin{aligned} \sigma^a &= \left(A_1^{ab} + B_1^{ab}\right)\theta^b + \left(A^{ba} - B^{ba}\right)\dot{\theta}^b \\ I^a &= \left(A^{ab} + B^{ab}\right)\theta^b + \left(A_4^{ab} + B_4^{ab}\right)\dot{\theta}^b \end{aligned} \tag{18}$$

Замечание 1: уравнения закона Гука для моментных напряжений (потоков) записан без учета диссипации (исключительно обратимые процессы).

Замечание 2: тензоры A_1^{ab}, A_2^{ab}, A_3^{ab}, A_4^{ab} в соотношениях (18) определяют свойства обратимых процессов, тензоры $B_1^{ab}, B_2^{ab}, B_3^{ab}, B_4^{ab}$ – свойства необратимых процессов.

Замечание 3: уравнения закона Гука можно записать через четыре тензора модулей неопределенной симметрии

$$\begin{aligned} \sigma^a &= E_1^{ab}\theta^b + E_3^{ab}\dot{\theta}^b \\ I^a &= E_2^{ab}\theta^b + E_4^{ab}\dot{\theta}^b \end{aligned} \tag{19}$$

В результате, когда рассматриваются квазистационарные процессы, можно пренебречь «скалярными импульсами», положив $E_2^{ab} = E_4^{ab} = 0$.

Получим обобщение вариационного принципа Седова Л.И. как следствие принципа возможных перемещений. Из принципа возможных перемещений имеем

$$\int_{t_0}^{t}\int_V\left(\sigma^a\delta\theta^a+I^a\delta\dot{\theta}^a+q_i^a\delta\theta_{,i}^a\right)dVdt=$$
$$=\delta\frac{1}{2}\int_{t_0}^{t}\int_V\left\{A_1^{ab}\theta^b\theta^a+2A^{ab}\dot{\theta}^b\theta^a+A_4^{ab}\dot{\theta}^b\dot{\theta}^a+A_5^{ab}\dot{\theta}_{,i}^b\dot{\theta}_{,i}^a\right\}dVdt+$$
$$+\frac{1}{2}\int_{t_0}^{t}\int_V\left\{B_1^{ab}\left(\theta^b\delta\theta^a-\theta^a\delta\theta^b\right)+2B^{ab}\left(\theta^b\delta\dot{\theta}^a-\dot{\theta}^a\delta\theta^b\right)+\right.$$
$$\left.+B_4^{ab}\left(\dot{\theta}^b\delta\dot{\theta}^a-\dot{\theta}^a\delta\dot{\theta}^b\right)+B_5^{ab}\left(\dot{\theta}_{,i}^b\delta\dot{\theta}_{,i}^a-\dot{\theta}_{,i}^a\delta\dot{\theta}_{,i}^b\right)\right\}dVdt=0. \qquad (20)$$

В вариационном равенстве типа Седова Л.И (20) исходная обратимая часть (см. (3)-(6)) дополняется билинейным слагаемым, объединяющим плотности потенциальной и кинетической энергии. По-видимому, такое обобщение предложено впервые. Заметим, что в рассматриваемой модели в общем случае допустимо существование 3+9+3+3=18 каналов диссипации.

Замечание. Если трактовать концентрацию примесей как концентрацию дислокаций замещения, то можно ввести понятие поля поврежденности. Для канала диссипации, связанного только с концентрацией примеси, плотность поврежденности определится величиной $2B^{33}\theta^3\delta\dot{\theta}^3$. Основываясь на этой понятии плотности поврежденности, можно ввести и модели деградации свойств материала. Как правило ограничиваются линейным законом деградации. В таком случае быть поставлена задача накопления повреждений за счет учета деградации свойств при деформировании. Эта задача, очевидно, является нелинейной, но ее приближенное решение строится с использованием итерационной процедуры методом, аналогичным методу упругих решений в пластичности. Более точный учет поврежденности с учетом связности можно осуществить, удерживая большее число каналов диссипации с концентрацией примеси.

Рассмотрим один частный случай вариационной линейной формы (20), являющейся в общем случае неинтегрируемой

$$\delta L-\overline{\delta U}=\int_{t_0}^{t}\int_V P_i^V\delta R_i dVdt+\int_{t_0}^{t}\int_F P_i^F\delta R_i dFdt+$$
$$+\int_{t_0}^{t}\int_V\left(\rho\dot{R}_i\delta\dot{R}_i+\rho^{ab}\dot{\theta}^b\delta\dot{\theta}^a\right)dVdt-$$
$$-\int_{t_0}^{t}\int_V\left(G_{ijmn}R_{m,n}\delta R_{i,j}+2A_1^{ab}\theta^b\delta\theta^a+C^{ab}\theta_{,i}^b\delta\theta_{,i}^a\right)dVdt- \qquad (21)$$
$$-\int_{t_0}^{t}\int_V 2B^{ab}\dot{\theta}^b\delta\theta^a dVdt=0,$$

где $\rho^{ab}=-A_4^{ab}$, G_{ijmn} – тензор модулей упругости рассматриваемого тела.

Обратим внимание на то, что неинтегрируемая вариационная линейная форма (21) учитывает только часть возможных каналов диссипации, и не все возможные слагаемые в плотности потенциальной энергии, т.е. не все эффекты связности. С точки зрения обобщенных уравнений закона Гука (18)-(19), вариационный принцип стационарности (21) является частным случаем при следующих гипотезах о свойствах моделируемой среды

$$\begin{cases} A^{ab}=0 \\ \rho^{ab}=-A_4^{ab} \\ C^{ab}=A_5^{ab} \end{cases} \qquad \begin{cases} B_1^{ab}=0 \\ B_4^{ab}=0 \\ B_5^{ab}=0 \end{cases}$$

Требование стационарности сформулированной неинтегрируемой линейной вариационной формы (21) является содержанием обобщенного вариационного принципа Седова Л.И. и может быть легко обобщен на среды с более богатым набором свойств.

3. УРАВНЕНИЯ ДВИЖЕНИЯ И ТЕПЛО- И МАССОПЕРЕНОСА

Требование стационарности сформулированной неинтегрируемой линейной вариационной формы (21) приводит к следующему вариационному уравнению

$$\begin{aligned} \delta L-\overline{\delta U}=&\int_{t_0}^{t}\int_{V}\left(-\rho\ddot{R}_i+P_i^V\right)\delta R_i dVdt+\int_{t_0}^{t}\int_{F}\left(P_i^F\delta R_i-C^{ab}\theta_{,i}^b n_i\delta\theta^a\right)dFdt+\\ &+\int_{V}\left(\rho\dot{R}_i\delta R_i+\rho^{ab}\dot{\theta}^b\delta\theta^a\right)dV\,\Big|_{t_0}^{t}-\\ &-\int_{t_0}^{t}\int_{V}\Big[G_{ijmn}R_{m,n}\delta R_{i,j}+\left(2A_1^{ab}\theta^b-2B^{ab}\dot{\theta}^b+\right.\\ &\left.+\rho^{ab}\ddot{\theta}^b-C^{ab}\Delta\theta^b\right)\delta\theta^a\Big]dVdt=0. \end{aligned} \tag{22}$$

Учтем в (22), что скаляр $\theta^1=R_{i,j}\delta_{ij}$ является зависимой переменной и слагаемые, содержащие его вариацию, должны быть взяты по частям. Чтобы сохранить тензорную запись в пространстве конфигураций, выберем орты конфигурационного пространства e^a и введем определение «плоского» тензора Кронекера $\delta_*^{ab}=\delta^{ab}-e^1e^1$. В результате

$$\begin{aligned} \delta L-\overline{\delta U}=&\int_{t_0}^{t}\int_{V}\Big[\Big(G_{ijmn}R_{m,nj}+2A_1^{1b}\theta_{,i}^b-2B^{1b}\dot{\theta}_{,i}^b+\rho^{1b}\ddot{\theta}_{,i}^b-C^{1b}\Delta\theta_{,i}^b-\\ &-\rho\ddot{R}_i+P_i^V\Big)\delta R_i+\Big(C^{ab}\Delta\theta^b-\rho^{ab}\ddot{\theta}^b+2B^{ab}\dot{\theta}^b-\\ &-2A_1^{ab}\theta^b\Big)\delta\left(\theta^c\delta_*^{ac}\right)\Big]dVdt+\int_{t_0}^{t}\int_{F}\Big\{\Big[P_i^F-G_{ijmn}n_jR_{m,n}+\\ &+\left(C^{1b}\Delta\theta^b-\rho^{1b}\ddot{\theta}^b+2B^{1b}\dot{\theta}^b-2A_1^{1b}\theta^b\right)n_i\Big]\delta R_i-\\ &-C^{ab}\theta_{,i}^b n_i\delta\theta^a\Big\}dFdt+\int_{V}\left(\rho\dot{R}_i\delta R_i+\rho^{ab}\dot{\theta}^b\delta\theta^a\right)dV\,\Big|_{t_0}^{t}=0. \end{aligned} \tag{23}$$

Уравнения движения

$$G_{ijmn}R_{m,nj}+2A_1^{1b}\theta_{,i}^b-2B^{1b}\dot{\theta}_{,i}^b+\rho^{1b}\ddot{\theta}_{,i}^b-C^{1b}\Delta\theta_{,i}^b-\rho\ddot{R}_i+P_i^V=0 \tag{23a}$$

Уравнение теплообмена

$$C^{2b}\Delta\theta^b-\rho^{2b}\ddot{\theta}^b+2B^{2b}\dot{\theta}^b-2A_1^{2b}\theta^b=0 \tag{23b}$$

Уравнение диффузии

$$C^{3b}\Delta\theta^b-\rho^{3b}\ddot{\theta}^b+2B^{3b}\dot{\theta}^b-2A_1^{3b}\theta^b=0 \tag{23c}$$

Отметим, что компоненты тензора B^{ab} могут иметь отрицательные значения, поэтому уравнения (23a)-(23c) не противоречат общепринятой записи уравнений движения, теплообмена и диффузии.

Тензор C^{ab}, является важной характеристикой, ибо, как следует из (11), он определяет масштабные эффекты, что уже отмечалось при трактовке потоков. В частном случае, когда тензоры физических свойств в конфигурационном пространстве являются диагональными, уравнения (23a)-(23c) распадаются и приобретают вид уравнения движения деформируемого тела

$$G_{ijmn}R_{m,nj} + 2A_1^{11}R_{m,mi} - 2B^{11}\dot{R}_{m,mi} + \rho^{11}\ddot{R}_{m,mi} - C^{11}\Delta R_{m,mi} - \rho\ddot{R}_i + P_i^V = 0, \quad (24)$$

уравнение гиперболической теплопроводности

$$C^{22}\Delta\theta^2 - \rho^{22}\ddot{\theta}^2 + 2B^{22}\dot{\theta}^2 - 2A_1^{22}\theta^2 = 0, \quad (25)$$

уравнение гиперболической диффузии

$$C^{33}\Delta\theta^3 - \rho^{33}\ddot{\theta}^3 + 2B^{33}\dot{\theta}^3 - 2A_1^{33}\theta^3 = 0. \quad (26)$$

Уравнение (24) является уравнением движения градиентной среды, в которой не учитываются температурные и диффузионные потоки. Из (25) и (26) следует, что эволюция температуры и концентрации имеет в общем случае диффузионно-волновой характер.

Краевая задача в каждой неособенной точке поверхности определяется шестью парами альтернативных граничных условий. В случае, когда связность отсутствует, т.е. тензоры физических свойств в конфигурационном пространстве являются диагональными, краевые задачи разделяются и в граничных условиях.

Для перемещений получаем

$$\int_{t_0}^{t}\int_F \Big[P_i^F - G_{ijmn}n_jR_{m,n} + \Big(C^{11}\Delta R_{m,m} - \rho^{11}\ddot{R}_{m,m} + 2B^{11}\dot{R}_{m,m} - $$
$$ - 2A_1^{11}R_{m,m}\Big)n_i\Big]\delta R_i dFdt = 0,$$

$$\int_{t_0}^{t}\int_F C^{11}R_{j,j}n_i\delta R_{i,i}dFdt = 0$$

Аналогично, для температуры отделяющиеся альтернативные граничные условия формулируются на несовместное изменение объёма θ^2

$$\int_{t_0}^{t}\int_F C^{22}\theta^2_{,i}n_i\delta\theta^2 dFdt = 0.$$

Альтернативные граничные условия могут быть записаны в следующей трактовке: или как «кинематические», когда вариация θ^2 равна нулю, или как «статические», когда градиент θ^2 равен нулю. Так как согласно (9b) линейный оператор по времени над θ^2 определен на всем интервале времени (кроме начального и конечного момента времени) и на всей поверхности, то действуя им на θ^2, можно сформулировать альтернативные граничные условия не на θ^2, а на температуру и условно записать их в виде

$$\int_{t_0}^{t}\int_F T_{,i}n_i\delta T dFdt = 0.$$

Для концентрации граничные условия имеют соответственно вид

$$\int_{t_0}^{t}\int_{F} C^{33}c_{,i}n_i\delta c dFdt = 0.$$

Пара альтернативных граничных условий для концентрации представляется следующим образом: или вариация θ^3 равна нулю, или градиент θ^3 равен нулю.

В случае, когда связность отсутствует, а тензоры физических свойств в конфигурационном пространстве являются диагональными, разделяется и краевая задача по времени. Для перемещений временные краевые условия записываются в виде

$$\int_V \left(\rho\dot{R}_i\delta R_i + \rho^{11}\dot{R}_{j,j}\delta R_{i,i}\right)dV\,|_{t_0}^{t} = 0.$$

Для температуры краевая задача по времени не может быть сформулирована и формулируется только относительно θ^2, если линейный по времени оператор температуры не определён в начальный и конечный моменты времени. Поэтому отделяющаяся нестационарная температурная задача может быть сформулирована относительно θ^2. В частности, краевая задача по времени имеет вид

$$\int_V \rho^{22}\dot{\theta}^2\delta\theta^2 dV\,|_{t_0}^{t} = 0.$$

Для концентрации

$$\int_V \rho^{33}\dot{\theta}^3\delta\theta^3 dV\,|_{t_0}^{t} = 0.$$

4. ОБОБЩЕННЫЙ ЗАКОН МАКСВЕЛЛА-КАТТАНЕО В СВЯЗАННОЙ ТЕОРИИ ТЕПЛО- И МАССОПЕРЕНОСА

Исключим с учетом гипотез (22) из продифференцированных по координатам уравнений закона Гука (19) для силовых факторов градиенты кинематических факторов, выраженные через потоки (11)

$$\begin{cases}\sigma^a_{,i} = E_1^{ab}\theta^b_{,i} + E_3^{ab}\dot{\theta}^b_{,i}\\ \theta^b_{,i} = C^{-bd}q_i^d\end{cases} \rightarrow \quad \sigma^a_{,i} = E_1^{ab}C^{-bd}q_i^d + E_3^{ab}C^{-bd}\dot{q}_i^d \tag{27}$$

Введем обозначения для сверток тензоров

$$\begin{cases}\left(AC\right)^{ad} = E_1^{ab}C^{-bd}\\ \left(BC\right)^{ad} = E_3^{ab}C^{-bd}\end{cases} \tag{28}$$

Чтобы разрешить систему (27) относительно потоков, определим тензор, обратный тензору $(AC)^{ad}$ (28), и с его помощью – тензоры «времен релаксации» τ^{fd} и «коэффициентов теплопроводности» k^{fa}

$$\left(AC\right)^{-fa}\left(AC\right)^{ad} = \delta^{fd}$$

$$\begin{cases}\tau^{fd} = \left(AC\right)^{-fa}\left(BC\right)^{ad}\\ k^{fa} = -\left(AC\right)^{-fa}\end{cases} \tag{29}$$

С помощью (29) составим линейные комбинации уравнений совместности с помощью уравнений (27)

$$q_i^f + \tau^{fd}\dot{q}_i^d = -k^{fd}\sigma^d_{,i}. \tag{30}$$

Рассмотрим несколько более подробно известные частные случаи (30). Закон теплопроводности Фурье при $f=2$ и $k^{22}=k_V$, $k^{fd}=0$, $\tau^{fd}=0$

$$q_i^2=-k^{22}T_{,i}.$$

Закон диффузии Фика при $f=3$ и $k^{33}=D,$ $k^{fd}=0$, $\tau^{fd}=0$

$$q_i^3=-D\pi_{,i}.$$

Закон теплопроводности Максвелла-Каттанео получаем из (30) при $f=2$ и $\tau^{22}\neq 0,$ $k^{22}=k_V$, $k^{fd}=0$, $\tau^{fd}=0$

$$q_i^2+\tau^{22}\dot{q}_i^2=-k^{22}T_{,i}.$$

Учет связности $k^{21}\neq 0$ при $f=2$ в уравнении (30) дает следующее обобщение закона теплопроводности [19,20]

$$q_i^2+\tau^{22}\dot{q}_i^2=-k^{21}p_{,i}-k^{22}T_{,i}.$$

Учет связности $k^{23}\neq 0$ при $f=2$ в (30) позволяет получить обобщение Закона Дюфура

$$q_i^2=-k^{22}T_{,i}-k^{23}\pi_{,i}.$$

Обобщение закон Соре вытекает из (30) при $f=3$, $k^{32}\neq 0$

$$q_i^3=-k^{32}T_{,i}-k^{33}\pi_{,i}.$$

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Дана вариационная формулировка связанной системы уравнений термоупругости, тепло- и массообмена. Уравнения движения, входящие в связанную систему уравнений, являются частным случаем градиентной теории (дилатационной модели) в части дифференциального оператора над перемещениями. Уравнения тепло- и массообмена имеют одинаковую структуру и отражают диффузионно-волновой механизм эволюции в сплошной среде температуры и примеси. Установлено, что связанная система уравнений распадается на три независимые краевые задачи относительно перемещений, несовместного изменения объёма, связанного с температурой, и несовместного изменения объёма, связанного с концентрацией примеси, когда тензоры физических свойств являются диагональными и соответствующие коэффициенты связности равны нулю. Уравнения совместности, полученные из обобщенных законов Гука для силовых факторов и их потоков путем исключения кинематических переменных, дают целый спектр законов теплопроводности, термофореза, диффузии и термоупругости, включая законы Фурье, Фика, Максвелла-Каттанео, Соре и Дюфура.

ЛИТЕРАТУРА

1. Nicholson D., Travis K. *Recent advances in gas separation by microporous ceramic membranes* // Membrane science and technology. – 2000. – Pp.323-334.
2. Demirel Y., Gerbaud V. *Fundamentals of Nonequilibrium Thermodynamics in Nonequilibrium Thermodynamics (Fourth Edition).* – Elsevier, 2019. – 880 p.
3. Demirel Y. *Nonequilibrium Thermodynamics Approaches in nonequilibrium thermodynamics (Second Edition)*. – Elsevier Science, 2007. – 754 p.

4. Hütter M., Theo A., Tervoort T.A. *Coarse graining in elasto-viscoplasticity: bridging the gap from microscopic fluctuations to dissipation* // Advances in applied mechanics. – 2009. – Vol.42. – Pp.253-317.
5. Andronescu E., Grumezescu A. *Nanostructures for drug delivery, a volume in micro and nano technologies.* – Elsevier, 2017. – 1024 p.
6. Awais M., Hayat T., Nawaz M., Alsaedi A. *Newtonian heating, thermal-diffusion and diffusion-thermo effects in an axisymmetric flow of a jeffery fluid over a stretching surface* // Braz. J. Chem. Eng. – 2015. – Vol.32. – No.2. – Pp.555-561.
7. Knyazeva A.G. *Cross Effects in Solid Media with Diffusion* // Journal of applied mechanics and technical physics. – 2003. – No.44. – Pp.373-384.
8. Aifantis E.C. *On the problem of diffusion in solids* // Acta mechanica. – 1980. – Vol.37. – No.3-4. – Pp.265-296.
9. Sherif H.H., Saleh H.A. *A half-space problem in the theory of generalized thermoelastic diffusion* // Int. J. Solids Structure. – 2005. – Vol.42. – Pp.4484-4493.
10. Sherief H.H., Hamza F.A., Saleh H.A. *The theory of generalized thermoelastic diffusion* // Int. J. Eng. Sci. – 2004. – Vol.42. – Pp.591-608.
11. Aouadi M. *Generalized theory of thermoelastic diffusion for anisotropic media* // J. of thermal stresses. – 2008. – Vol.31. – Pp.270-285.
12. Aouadi M. *On the coupled theory of thermo-magnetoelectroelacticity* // J. Mech. Appl. Math. – 2007. – Vol.60. – Pp.443-456.
13. Podstrigach Ia.S., Shevchuk P.R. *Variational form of the equations of the theory of thermodiffusion processes in a deformable solid: PMM* // Journal of applied mathematics and mechanics. – 1969. – Vol.33. – No.4. – Pp.774-776.
14. Князева А. *Диффузия по вакансионному механизму в материалах с большим числом внутренних поверхностей* // Химия в интересах устойчивого развития. – 2005. – №13. – Pp.233-242.
15. Parfenova E.S., Knyazeva A.G. *The influence of some model parameters on the impurity distribution implanted into substrate surface* / IOP Conf. Series: materials science and engineering. – Tomsk: Institute of Physics Publishing, 2016. – 012085.
16. Knyazeva A.G. *Cross Effects in Solid Media with Diffusion* // Journal of applied mechanics and technical physics. – 2003. – No.44. – Pp.373-384.
17. Anisimova M., Sevostianov I. *Dependence of the effective diffusion coefficient of a matrix composite on the size of inhomogeneities* // Applied mechanics and materials. – 2015. – No.756. – Pp.389-393.
18. Белов П.А., Лурье С.А. *Вариационная постановка связанных диссипативных задач механики сплошной среды* // Механика композиционных материалов и конструкций. – 2019. – Т.25. – №3. – С.434-447.
19. Lurie S., Belov P. *From generalized theories of media with fields of defects to closed variational models of the coupled gradient thermoelasticity and thermal conductivity* / In: Advanced structured materials, H. Altenbach et al. (eds.). – 2019. – Pp.135-154.
20. Lurie S.A., Belov P.A., Volkov-Bogorodskii D.B. *Variational models of coupled gradient thermoelasticity and thermal conductivity* // Materials physics and mechanics. – 2019. – Vol.42. – No.4. – Pp.564-581.
21. Belov P.A., Lurie S.A., Dobryanskiy V.N. *Variational formulation of linear equations of coupled thermohydrodynamics and heat conductivity* // Lobachevskii journal of mathematics. – 2020. – Vol.41. – No.10. – Pp.1949-1963.

REFERENCES

1. Nicholson D., Travis K. *Recent advances in gas separation by microporous ceramic membranes*. Membrane science and technology, 2000, Pp.323-334.
2. Demirel Y., Gerbaud V. *Fundamentals of Nonequilibrium Thermodynamics in Nonequilibrium Thermodynamics (Fourth Edition).* Elsevier, 2019, 880 p.
3. Demirel Y. *Nonequilibrium Thermodynamics Approaches in nonequilibrium thermodynamics (Second Edition).* Elsevier Science, 2007, 754 p.
4. Hütter M., Theo A., Tervoort T.A. *Coarse graining in elasto-viscoplasticity: bridging the gap from microscopic fluctuations to dissipation.* Advances in applied mechanics, 2009, Vol.42, Pp.253-317.
5. Andronescu E., Grumezescu A. *Nanostructures for drug delivery, a volume in micro and nano technologies.* Elsevier, 2017, 1024 p.
6. Awais M., Hayat T., Nawaz M., Alsaedi A. *Newtonian heating, thermal-diffusion and diffusion-thermo effects in an axisymmetric flow of a jeffery fluid over a stretching surface.* Braz. J. Chem. Eng., 2015, Vol.32, No.2, Pp.555-561.
7. Knyazeva A.G. *Cross Effects in Solid Media with Diffusion.* Journal of applied mechanics and technical physics, 2003, No.44, Pp.373-384.
8. Aifantis E.C. *On the problem of diffusion in solids.* Acta mechanica, 1980, Vol.37, No.3-4, Pp.265-296.
9. Sherif H.H., Saleh H.A. *A half-space problem in the theory of generalized thermoelastic diffusion.* Int. J. Solids Structure, 2005, Vol.42, Pp.4484-4493.
10. Sherief H.H., Hamza F., Saleh H. *The theory of generalized thermoelastic diffusion.* Int. J. Eng. Sci., 2004, Vol.42, Pp.591-608.
11. Aouadi M. *Generalized theory of thermoelastic diffusion for anisotropic media.* J. of thermal stresses, 2008, Vol.31, Pp.270-285.
12. Aouadi M. *On the coupled theory of thermo-magnetoelectroelacticity.* J. Mech. Appl. Math., 2007, Vol.60, Pp.443-456.
13. Podstrigach Ia.S., Shevchuk P.R. *Variational form of the equations of the theory of thermodiffusion processes in a deformable solid: PMM.* Journal of applied mathematics and mechanics, 1969, Vol.33, No.4, Pp.774-776.
14. Knyazeva A. *Diffuziya po vakansionnomu mekhanizmu v materialakh s bol'shim chislom vnutrennikh poverkhnostej [Diffusion by the vacancy mechanism in materials with a large number of internal surfaces]*. Khimiya v interesakh ustojchivogo razvitiya, 2005, No.13, Pp.233-242.
15. Parfenova E.S., Knyazeva A.G. *The influence of some model parameters on the impurity distribution implanted into substrate surface*. IOP Conf. Series: materials science and engineering. Tomsk, Institute of Physics Publishing, 2016, 012085.
16. Knyazeva A.G. *Cross Effects in Solid Media with Diffusion.* Journal of applied mechanics and technical physics, 2003, No.44, Pp.373-384.
17. Anisimova M., Sevostianov I. *Dependence of the effective diffusion coefficient of a matrix composite on the size of inhomogeneities.* Applied mechanics and materials, 2015, No.756, Pp.389-393.
18. Belov P.A., Lur'e S.A. *Variatsionnaya postanovka svyazannykh dissipativnykh zadach mekhaniki sploshnoj sredy [Variational statement of coupled dissipative problems in continuum mechanics]*. Mekhanika kompozitsionnykh materialov i konstruktsii, 2019, Vol.25, No.3, Pp.434-447.
19. Lurie S., Belov P. *From generalized theories of media with fields of defects to closed variational models of the coupled gradient thermoelasticity and thermal conductivity.* In: Advanced structured materials, 2019, Pp.135-154.

20. Lurie S.A., Belov P.A., Volkov-Bogorodskii D.B. *Variational models of coupled gradient thermoelasticity and thermal conductivity.* Materials physics and mechanics, 2019, Vol.42, No.4, Pp.564-581.
21. Belov P.A., Lurie S.A., Dobryanskiy V.N. *Variational formulation of linear equations of coupled thermohydrodynamics and heat conductivity.* Lobachevskii journal of mathematics, 2020, Vol.41, No.10, Pp.1949-1963.

Поступила в редакцию 22 сентября 2020 года.

Сведения об авторах:

Белов Петр Анатольевич – д.ф.-м.н., в.н.с., ФГБУН Институт прикладной механики РАН, г. Москва, Россия; e-mail: belovpa@yandex.ru

Лурье Сергей Альбертович – д.т.н., проф., гл.н.с., ФГБУН Институт прикладной механики РАН, г. Москва, Россия; e-mail: salurie@mail.ru