Gyengén nemlokális kontinuumelméletek:

szilárd vagy folyadék, kontinuum vagy részecske?

Ván Péter
MTA, RMKI, Elméleti Főosztály és BME, Kémiai Fizika Tanszék

- Bevezetés
- II. főtétel és mechanika
- Példák:
  - Két komponensű folyadék (CM)
  - Egy komponensű Korteweg-folyadékok (QM)
- Összegzés

Halmaz-állapot: szilárd, folyadék és gáz

Hogyan szeret az anyag elhelyezkedni a térben?

	Térfogat	Alak
Szilárd	Tartja	Tartja
Folyadék	Tartja	Nem tartja
Gáz	Nem tartja	Nem tartja

nyírószilárdság

“globális-térfogati szilárdság”

Átmenetek:

egyensúly? idő? -- reológia

anyagi tulajdonság? -- plaszticitás, homok

Nemegyensúlyi termodinamika

Termodinamika $\neq$ hőmérséklet tudománya

Termodinamika $\neq$ makroszkópikus energiaváltozások tudománya

Termodinamika (?) $=$ makroszkópikus kontínuumok általános keretelmélete

Általános elvek:

- objektivitás
- II. főtétel $\Rightarrow$ mechanika reverzibilis törvényei – speciális határeset

Elméletek, a lokális egyensúlyon túl:

	Tér	Idő
Erősen nemlokális	Térintegrálok	Memória funkcionálok
Gyengén nemlokális	Gradiensfüggő anyagfüggvények	Időderivált függő anyagfüggvények
Újra lokalizált	Áramszorzók	Dinamikai (belső) változók

II. főtétel - erős megszorítások

Gyakorlat (alkalmazások):

- Általánosított hővezetés (Guyer-Krumhansl)
- ‘Gradiens’ anyagok a mechanikában (mikroszerkezet)
  - folyadékkristályok (Oseen-Frank)
  - mikrorepedezés, károsodás
  - porózus anyagok (Goodman-Cowin)
  - homok (Rajagopal-Massoudi)
  - nyírófelületek szerkezete
- Korteweg-folyadékok
- Turbulencia
- Struktúraképző egyenletek (fázismező)
  - Ginzburg-Landau, Cahn-Hilliard, etc… és ezeken túl

….

Irreverzibilis termodinamika

II. főtétel: <u>megszorítás</u> az anyagegyenletekre

<u>Dinamika (mérlegek):</u>

$$\dot{\rho} + \rho \nabla \cdot \mathbf{v} = 0$$

$$\rho \dot{\mathbf{v}} + \nabla \cdot \mathbf{P} = \mathbf{0}$$

<u>Energiamérlegek:</u>

$$\rho e_T = \frac{1}{2}\rho v^2 + \rho u$$

$$\dots$$

$$\rho \dot{u} + \nabla \cdot \mathbf{j}_u = \mathbf{P} : \nabla \circ \mathbf{v}$$

<u>Entrópiamérleg:</u>

$$\rho \dot{s}(\rho, u) + \nabla \cdot (\underbrace{\partial_u s}_{1/T}\, \mathbf{j}_u) = -\partial_u s \quad : \nabla \circ \mathbf{v} \geq 0$$

-p

Egyensúly!

Szilárd test: $\rho \rightarrow \varepsilon$

Termodinamikai elmélet általában

Dinamikai törvény: $$\dot{a} = f(a)$$

1 Sztatika (egyensúlyi tulajdonságok)

2 Dinamika

$$\dot{S}(a) = DS(a) \cdot \dot{a} = DS(a) \cdot f(a) \geq 0$$

Stabilitási szerkezet $\Rightarrow$ Dinamikai szerkezet

Általánosabban:

$$\dot{\mathbf{a}} + \nabla \cdot \mathbf{j}_a = \sigma_a$$ mérlegek (más is lehet) $\mathbf{a} = (\rho, \rho\mathbf{v}, \ldots)$

– állapottér: $\mathbf{a}$
– konstitutív tér: $C = (\mathbf{a}, \dot{\mathbf{a}}, \nabla\mathbf{a}, \ldots, \xi)$
– anyagfüggvények: $\mathbf{j}_a(C)$

gyengén nemlokális

<u>Második főtétel:</u>

$$\dot{s}(C) + \nabla \cdot \mathbf{j}_s(C) = \sigma_s \geq 0$$

Anyagelmélet

Módszer: Liu eljárás - Farkas lemma - Lagrange szorzók
De: konstruktívan

Két komponensű gyengén nemlokális keverék

$$\rho = \nu_1\gamma_1 + \nu_2\gamma_2 = \nu\gamma$$

γ szilárd komponens sűrűsége
ν térfogateloszlási függvény

$$\boxed{\begin{aligned} &\dot{\gamma} = 0 \\ &\dot{\nu} + \nu\nabla\cdot\mathbf{v} = 0 \\ &\nu\gamma\dot{\mathbf{v}} + \nabla\cdot\mathbf{P}(C) = \mathbf{0} \\ &\dot{s}(C) + \nabla\cdot\mathbf{j}_s(C) \geq 0 \end{aligned}}$$

$(\gamma, \nu, \mathbf{v})$ alapállapot

$$C = (\gamma, \nabla\gamma, \nu, \nabla\nu, \mathbf{v}, \nabla\mathbf{v})$$

konstitutív állapot

$$s(C), \mathbf{j}_s(C), \mathbf{P}(C)$$

konstitutív függvények

Kényszerek: $(1), \nabla(1), (2), \nabla(2), (3)$

Liu-egyenletek

$$\rho\partial_{\gamma} s = \Gamma_1,$$
$$\rho\partial_{\nabla\gamma} s = \Gamma_2,$$
$$\rho\partial_{\nu} s = \Gamma_3,$$
$$\rho\partial_{\nabla\nu} s = \Gamma_4,$$
$$\rho\partial_{\mathbf{v}} s = \Gamma_5,$$
$$\rho\partial_{\nabla\mathbf{v}} s = \mathbf{0},$$
$$(\partial_{\nabla\nu}\mathbf{j}_s - \Gamma_5\partial_{\nabla\nu}\mathbf{P})^s = \mathbf{0},$$
$$(\partial_{\nabla\lambda}\mathbf{j}_s - \Gamma_5\cdot\partial_{\nabla\gamma}\mathbf{P})^s = \mathbf{0},$$
$$(\partial_{\nabla\mathbf{v}}\mathbf{j}_s - \Gamma_4\nu\mathbf{I} - \Gamma_5\cdot\partial_{\nabla\mathbf{v}}\mathbf{P})^s = \mathbf{0}.$$

$$\partial_{\mathbf{v}\nabla\nu} s = \mathbf{0},$$
$$\partial_{\mathbf{v}\nabla\gamma} s = \mathbf{0},$$
$$\partial_{\nabla\nu\nabla\nu} s = \mathbf{0},$$
$$\partial_{\nabla\nu\nabla\gamma} s = \mathbf{0}.$$

izotróp, másodrendű

Megoldás:

$$\boxed{s(\nu,\nabla\nu,\gamma,\nabla\gamma,\mathbf{v}) = s_e(\nu,\gamma) - m(\nu,\gamma)\,\frac{\mathbf{v}^2}{2} - \alpha(\nu,\gamma)\,\frac{(\nabla\gamma)^2}{2}}$$

$$\mathbf{j}_s(C) = -\,m(\nu,\gamma)\;\mathbf{v}\cdot\mathbf{P}(C) - \mathbf{j}_1(\nu,\gamma,\mathbf{v}).$$

$$-\nabla(m\mathbf{v}) : \mathbf{P} + \rho(\alpha\nabla\gamma\circ\nabla\gamma - \nu\partial_\nu s\mathbf{I}) : \nabla\mathbf{v} \geq 0$$

Egyszerűsítés:

$$m = 1, \quad \mathbf{j}_1(\nu,\gamma,\mathbf{v}) = \mathbf{0}, \quad \partial_\nu s_e = -\frac{p}{\rho^2}.$$

Entrópia produkció:

$$-\left(\mathbf{P}-\underbrace{\boxed{(p+\rho\partial_\nu\alpha\frac{(\nabla\gamma)^2}{2})\mathbf{I}-\rho\alpha\nabla\gamma\circ\nabla\gamma}}_{\mathbf{P}^r}\right):\nabla\mathbf{v}\geq 0$$

Coulomb-Mohr

Goodman-Cowin:

$$\mathbf{P}^r=(p+\alpha(\nabla\nu)^2+2\alpha\nu\Delta\nu)\mathbf{I}-2\alpha\nabla\nu\circ\nabla\nu$$

$$\gamma\ddot{\nu}-\nabla\cdot\mathbf{h}=\sigma_{\dot{\nu}}$$

Konfigurációs erők mérlege

Coulomb-Mohr:

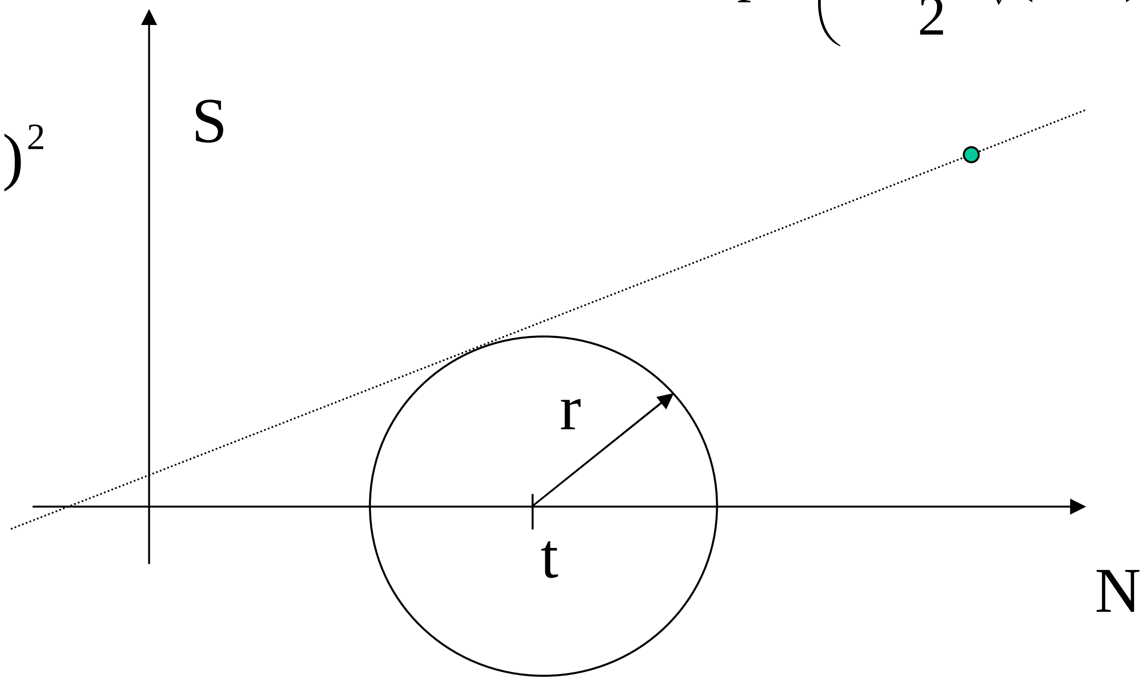
$$N := \mathbf{n} \cdot \mathbf{P}^{r} \cdot \mathbf{n} \qquad S^2 := (\mathbf{P}^{r} \cdot \mathbf{n})^2 - N^2$$

$$S^2 + (N - t)^2 = r^2$$

$$r = \rho\alpha(\nabla\gamma)^2$$

$$t = p + \rho\left(\frac{\partial_\nu \alpha}{2} - \alpha\right)(\nabla\gamma)^2$$

$$t = p + \left(1 + \frac{1}{2}\partial_\nu(\ln\alpha)\right)r$$



$$(\nabla\gamma)^2 \geq D_{cr}$$

instabil

Korteweg-folyadékok

$$\mathbf{P}^r_{Kor} = \left(-p + \alpha\Delta\rho + \beta(\nabla\rho)^2\right)\mathbf{I} + \delta\nabla\rho \circ \nabla\rho + \gamma\nabla^2\rho$$

$$\boxed{\begin{aligned} &\dot{\rho} + \rho\nabla\cdot\mathbf{v} = 0 \\ &\rho\dot{\mathbf{v}} + \nabla\cdot\mathbf{P}(C) = \mathbf{0} \\ &\rho\dot{s}(C) + \nabla\cdot\mathbf{j}_s(C) \geq 0 \end{aligned}}$$

$(\rho, \mathbf{v})$ állapottér

$$C_{wnl} = (\rho, \nabla\rho, \nabla\nabla\rho, \nabla\mathbf{v})$$

konstitutív tér

$$s(C), \mathbf{j}_s(C), \mathbf{P}(C)$$

$\Uparrow$

állapotfüggvények

Liu eljárás:

$$s = s_e(\rho, \nabla\rho) \qquad\qquad \mathbf{j}_s = \ldots$$

$$\sigma_s = -\left(\underbrace{\mathbf{P} - \overbrace{\rho^2\left[\qquad\qquad -\partial_\rho s\right]\mathbf{I}}^{\mathbf{P}^r \text{ reverzibilis nyomás}}}_{\mathbf{P}^v = \mathbf{P} - \mathbf{P}^r}\right) : \nabla\mathbf{v} \ge 0$$

<u>Schrödinger-Madelung folyadék</u>

$$s_{SchM}(\rho, \nabla\rho) = -\frac{\nu_{SchM}}{2}\left(\frac{\nabla\rho}{2\rho}\right)^2$$

$$\mathbf{P}^{\mathrm{r}}_{\mathrm{SchM}} = -\frac{1}{8}\left(\Delta\rho\mathbf{I} + \nabla^2\rho - \frac{2\nabla\rho\otimes\nabla\rho}{\rho}\right)$$

- Potenciálként : $$\nabla \cdot \mathbf{P}^{\mathrm{r}} = \rho \nabla \mathrm{U}_{\mathrm{Q}}$$

$$\Psi = \sqrt{\rho} e^{-i\nabla \mathbf{v}}$$

- Bernoulli egyenlet

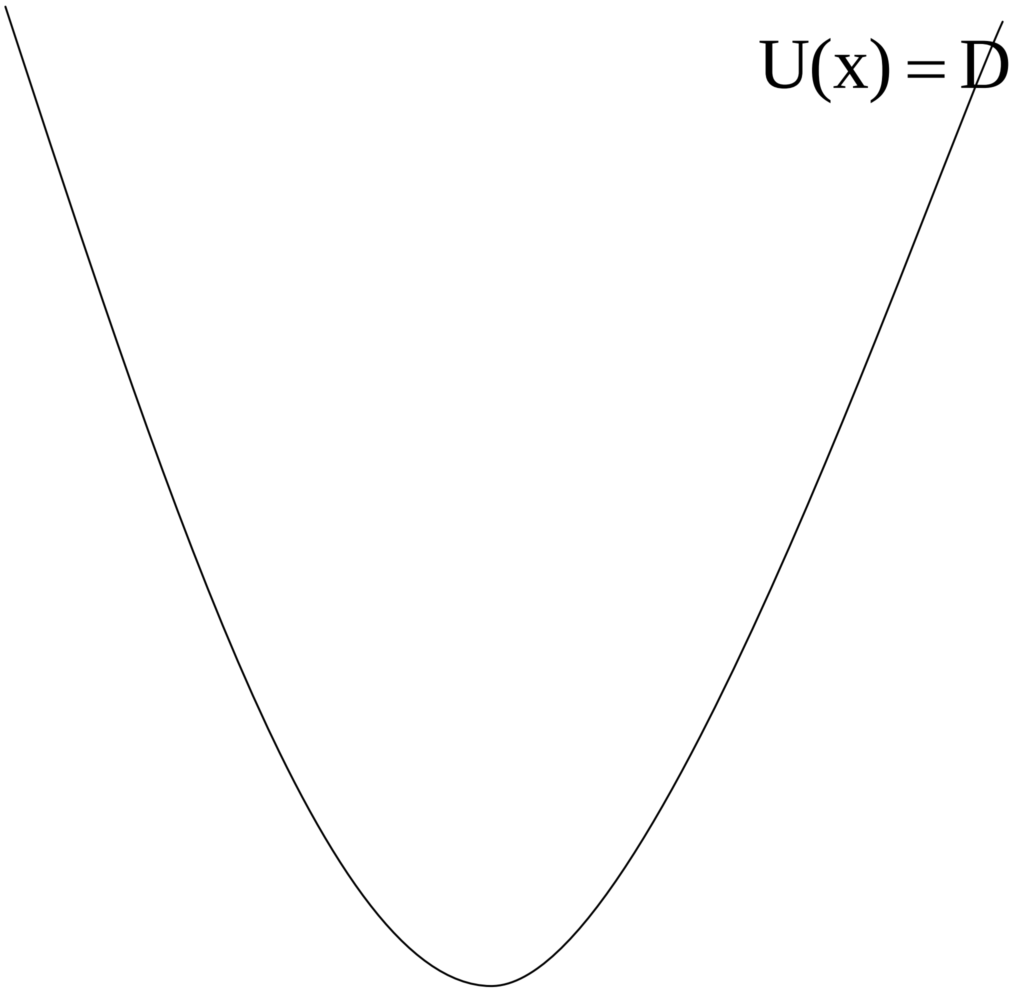
$$\boxed{\text{Schrödinger egyenlet}}$$

- $$U_Q = -\partial_\rho (\rho s_e) + \nabla \cdot (\rho \partial_{\nabla \rho} s_e)$$

Euler-Lagrange

Variációs eredet

$$U(x) = D\frac{x^2}{2}$$



Mov1.exe

Összefoglalás

– Második főtétel
  - Mozgásegyenletek konstrukciója és korrekciója
  - Anyag - jellemzők
  - Prediktív
– Újabb eredmények:
  - Objektív: téridőben gyengén nemlokális!
– Szilárd-folyadék-gáz:

ANYAG

Köszönet:

A magyar termodinamikai kutatási tradíciónak:

Szily Kálmán,
Farkas Gyula,
Fényes Imre,
Gyarmati István,
....