УДК 539.3

До проблеми фізичної інтерпретації тензора дифузійних напружень і кінетичної енергії дифузії

Єжи Вирвал

Доктор габ. інж., професор, Політехніка Опольська, вул. Катовіцька, 48, Ополе, 45061, Польща,
e-mail: vyrval@5po.opole.pl

На прикладі двокомпонентної суміші обговорюються питання, пов'язані з фізичною інтерпретацією виразів, що містять дифузійну швидкість компонент. Такі складові є в рівняннях балансу кількості руху й енергії суміші. Показано, що наслідком означення дифузійної швидкості як різниці швидкостей компоненти і центру маси суміші є труднощі фізичної інтерпретації тензора дифузійних напружень (у рівняннях балансу кількості руху) й кінетичної енергії дифузії (у рівнянні балансу енергії). Просту фізичну інтерпретацію має лише добуток густини компоненти та її дифузійної швидкості у рівнянні балансу маси, тобто густина дифузійного потоку маси. Показано, що у випадку сумішей із більше ніж двох компонент виникають труднощі у формулюванні конститутивних рівнянь, які означають дифузійні потоки маси.

Ключові слова: теорія сумішей, дифузія, багатокомпонентні середовища.

Вступ. Процеси перенесення маси, кількості руху й енергії у двокомпонентному середовищі (наприклад, вологому повітрі, яке є сумішшю водяної пари і сухого повітря) моделюють зазвичай з використанням теорії сумішей [5]. За такого підходу двокомпонентна суміш є суперпозицією (накладанням) двох континуумів $C_\alpha\ (\alpha = 1, 2)$, що називаються його складовими (компонентами). Вони заповнюють у момент часу t одну і ту ж область простору. Компоненти складаються з матеріальних частинок різного роду. Приймається також, що в довільній точці простору $\vec{x}$, яка належить до області заповненої сумішшю, перебувають одночасно частинки всіх складових.

Одним з базових постулатів теорії сумішей є такий: рівняння балансу маси, кількості руху й енергії суміші (трактованої як ціле) повинні мати такий самий вигляд, як балансові співвідношення однокомпонентного матеріального континууму. Тому властивості суміші є суперпозицією властивостей усіх компонент. Зокрема, балансові рівняння суміші отримують підсумовуванням балансових рівнянь для компонент із використанням формул для швидкості центру маси суміші (бароцентричної швидкості), а також відносної швидкості компонент суміші (дифузійної швидкості). Як наслідок, у балансових рівняннях присутні складові, що містять дифузійні швидкості її компонент. Хоча за такого підходу дифузійна швидкість є зручним параметром опису багатьох властивостей сумішей [4], однак фізична інтерпретація виразів, що її містять, наштовхується на труднощі як з погляду теорії сумішей, так й інших теорій опису дифузійних явищ [1, 4]. Аналіз деяких причин цих труднощів є метою цієї праці.

У випадку компонент з густиною ρ_α і швидкістю $\vec{v}_\alpha$ густина суміші означається як

$$\rho = \sum_{\alpha=1}^{2} \rho_\alpha, \tag{1}$$

а її бароцентрична швидкість — залежністю

$$\vec{v} = \sum_{\alpha=1}^{2} c_\alpha \vec{v}_\alpha, \tag{2}$$

де

$$c_\alpha = \frac{\rho_\alpha}{\rho} \tag{3}$$

є масовою концентрацією компонент суміші, причому

$$\rho = \sum_{\alpha=1}^{2} \rho_\alpha \quad \text{і} \quad \sum_{\alpha=1}^{2} c_\alpha = 1. \tag{4}$$

Особливо важлива в теорії сумішей є дифузійна швидкість компоненти, означувана як

$$\vec{u}_\alpha = \vec{v}_\alpha - \vec{v}. \tag{5}$$

Слід підкреслити, що з приведеного вище означення випливає, що суміш розглядається як континуум, що рухається з швидкістю $\vec{v}$, в якому відбувається змішування компонент із швидкістю $\vec{u}_\alpha$. Це змішування трактується як дифузійний рух компонент. Наслідком такого підходу є можливість виключення з розгляду швидкості компоненти $\vec{v}_\alpha$ і заміна її бароцентричною швидкістю $\vec{v}$ та дифузійною швидкістю $\vec{u}_\alpha$.

Множення (5) на ρ_α дозволяє визначити вектор густини потоку маси компоненти як

$$\rho_\alpha \vec{v}_\alpha = \rho_\alpha \vec{v} + \vec{j}_\alpha, \tag{6}$$

де

$$\vec{j}_\alpha = \rho_\alpha \vec{u}_\alpha \tag{7}$$

є вектор густини дифузійного потоку. Цей вектор визначає швидкість обміну масою компоненти суміші через поверхню, що рухається зі швидкістю суміші.

Враховуючи співвідношення (7) та рівняння балансу маси компоненти суміші [4]

$$\frac{\partial \rho_\alpha}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \left(\rho_\alpha \vec{v}_\alpha\right) = c_\alpha^*, \tag{8}$$

отримуємо рівняння дифузії [4]

$$\rho\left(\frac{\partial c_\alpha}{\partial t}+\vec{v}\cdot\nabla c_\alpha\right)+\vec{\nabla}\cdot\vec{j}_\alpha=c_\alpha^*, \tag{9}$$

де $\partial/\partial t$ — локальна похідна за часом, $\vec{\nabla}$ — оператор Гамільтона, крапка — скалярний добуток векторів, а c_α^* — джерело маси компоненти α. Приведене вище рівняння має ту практичну перевагу, що воно містить швидкість $\vec{v}$, яку можна експериментально визначити, та дифузійний потік $\vec{j}_\alpha$, який можна знайти з використанням відповідних конститутивних зв'язків.

Найпростіший конститутивний зв'язок, що визначає вигляд $\vec{j}_\alpha$, можна прийняти у вигляді

$$\vec{j}_\alpha=-\rho D\vec{\nabla}c_\alpha, \tag{10}$$

так званого (першого) закону Фіка [4, 7], де D є коефіцієнтом дифузії. Закон (10) характерний для дифузії в нестисливій ($\rho=const$) двокомпонентній суміші за ізотермічних умов.

Підсумовуючи співвідношення (6) по всіх компонентах суміші і використовуючи означення (1)-(3), отримаємо співвідношення

$$\sum_{\alpha=1}^{2}\rho_\alpha\vec{v}_\alpha=\sum_{\alpha=1}^{2}\left(\rho_\alpha\vec{v}+\vec{j}_\alpha\right)=\rho\vec{v}+\sum_{\alpha=1}^{2}\vec{j}_\alpha\ . \tag{11}$$

З останнього співвідношення та формул (2)і (3) дістаємо важливу залежність

$$\sum_{\alpha=1}^{2}\vec{j}_\alpha=0\,. \tag{12}$$

Варто зауважити, що зв'язок (10) задовольняє умову (12), оскільки з (4), як наслідок, маємо $\sum_{\alpha=1}^{2}\vec{\nabla}c_\alpha=0.$

Із співвідношення (12) випливає, що вектор $\vec{j}_\alpha$ описує тільки взаємне переміщення компонент і пов'язаний з дифузійним рухом (має характер теплового руху [4], сумарний імпульс якого дорівнює нулю). Тому дифузія компонент суміші не впливає на вектор потоку маси суміші $\rho\vec{v}$, тобто на рух суміші як цілого.

Оскільки складові, що містять дифузійну швидкість, не впливають на рух суміші як цілого, то балансові рівняння суміші можна подати у загальновідомій формі, а саме [4, 7]:

— баланс маси

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\vec{\nabla}\cdot\left(\rho\vec{v}\right)=0, \tag{13}$$

— баланс імпульсу

$$\frac{\partial(\rho\vec{v})}{\partial t}+\vec{\nabla}\cdot(\rho\vec{v}\vec{v})=\vec{\nabla}\cdot\hat{T}+\rho\vec{g}, \tag{14}$$

— баланс внутрішньої енергії

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t}+\vec{\nabla}\cdot(\rho u\vec{v})=-\vec{\nabla}\cdot\vec{q}+r+w, \tag{15}$$

де $\hat{T}$ — тензор напруження, $\vec{g}$ — вектор масових сил, u — внутрішня енергія, $\vec{q}$ — вектор потоку тепла, r — джерело тепла, w — потужність внутрішніх джерел енергії [4, 7].

Рівняння (13)-(15) мають формально такий самий вигляд, як відповідні рівняння для однокомпонентного матеріального континууму. Тим самим виконано основний постулат теорії сумішей про аналогію рівнянь балансу маси, імпульсу й енергії для суміші та матеріального континууму. Однак, слід зауважити, що величини в балансових рівняннях, а саме густина (1), швидкість (2), а також [7]:

— тензор напруження

$$\hat{T}=\sum_{\alpha=1}^{2}\left(\hat{T}_\alpha-\hat{T}_{D\alpha}\right), \tag{16}$$

— внутрішня енергія

$$\rho u=\sum_{\alpha=1}^{2}\rho_\alpha\left(u_\alpha+u_{D\alpha}\right), \tag{17}$$

— тепловий потік

$$\vec{q}=\sum_{\alpha=1}^{2}\left\{\vec{q}_\alpha+\left[\left(u_\alpha+u_{D\alpha}\right)\hat{I}-\frac{\hat{T}_\alpha}{\rho_\alpha}\right]\cdot\vec{j}_\alpha\right\} \tag{18}$$

мають цілком інше фізичне трактування, ніж відповідні величини, що зустрічаються в балансових рівняннях для матеріального континууму. У приведених вище залежностях $\hat{T}_\alpha$ — тензор парціальних напружень [6], u_α — внутрішня енергія компоненти α, $\vec{q}_\alpha$ — вектор теплового потоку в компоненті α, а $\hat{I}$ — одиничний тензор.

У співвідношенні (16) величина $\hat{T}_{D\alpha}$ визначається як тензорний добуток дифузійних швидкостей компонент

$$\hat{T}_{D\alpha}=\rho_\alpha\vec{u}_\alpha\vec{u}_\alpha, \tag{19}$$

звана тензором дифузійного напруження [4, 5], а у формулах (17), (18) — величина

$$u_{D\alpha}=\frac{1}{2}\vec{u}_\alpha\cdot\vec{u}_\alpha, \tag{20}$$

означається скалярним добутком цих швидкостей та називається кінетичною енергією дифузії компоненти. Визначення фізичного сенсу цих величин, які в літературі інтерпретують як додаткове напруження та додаткову енергію, що відповідає змішуванню компонент, не є простим. Однією з причин цього є трудність фізичної інтерпретації дифузійної швидкості [2].

Враховуючи співвідношення (7), (10) та (3), одержуємо залежність, яка визначає дифузійну швидкість $\vec{u}_\alpha$ компоненти C_α суміші у вигляді

$$\vec{u}_\alpha = -D\frac{\vec{\nabla} c_\alpha}{c_\alpha}. \tag{21}$$

Аналіз останнього співвідношення показує, що дифузійна швидкість компоненти зростає зі зменшенням концентрації. Це має важливі фізичні наслідки. Щоб це показати, розглянемо випадок односпрямованої стаціонарної дифузії компоненти C_1 у двокомпонентному шарі товщини d вздовж напрямку Ox, перпендикулярного до серединної площини шару. З формули (21) випливає, що для розглядуваного випадку вектор дифузійної швидкості компоненти є такий

$$\vec{u}_1 = -\frac{D}{c_1}\frac{dc_1}{dx}\vec{i}\,. \tag{22}$$

У випадку граничних умов

$$c_1(0) = 1,\ \ c_1(d) = 0, \tag{23}$$

концентрація розглядуваної компоненти в шарі описується лінійною залежністю

$$c_1(x) = -\frac{x}{d} + 1\,. \tag{24}$$

Оскільки

$$\frac{dc_1}{dx} = -\frac{1}{d}, \tag{25}$$

то згідно формули (22) для визначення вектора дифузійної швидкості компоненти маємо

$$\vec{u}_1(x) = -\frac{D}{c_1}\frac{dc_1}{dx}\vec{i} = -\frac{D}{x-d}\vec{i}\,. \tag{26}$$

Звідси випливає, що на границях шару

$$\vec{u}_1(x=0) = \frac{D}{d}\vec{i}\,, \tag{27}$$

і

$$\vec{u}_1(x \to d) \to \infty. \tag{28}$$

З останнього співвідношення випливає, що коли концентрація компоненти (а отже і її густина) зменшується до нуля, то її дифузійна швидкість зростає до безмежності. Такий результат суперечить фізичній природі процесу дифузії при якому частинки дифундуючої компоненти рухаються зі скінченною швидкістю. Тому можна зробити висновок, що в розглядуваній моделі двокомпонентної суміші дифузійна швидкість, введена співвідношенням (5), є величиною абстрактною, якій важко надати фізичну інтерпретацію.

Легко переконатись, що добуток густини компоненти та її дифузійної швидкості, тобто вектор дифузійного потоку маси

$$\vec{j}_1(x) = \rho_1 \vec{u}_1 = -\rho \frac{c_1 D}{c_1} \frac{dc_1}{dx} \vec{i} = \rho \frac{D}{d} \vec{i} = const \,, \tag{29}$$

не характеризується ніякою особливістю, оскільки в розглядуваному випадку є величиною сталою в кожній точці аналізованого шару.

Отже, проведений вище аналіз показує, що, хоча введення дифузійної швидкості (5) полегшує аналіз суміші як цілого і може успішно використовуватись у задачах опису дифузії маси компонент суміші, однак виникають проблеми в інтерпретації виразів (16)-(18), які містять добутки цієї швидкості.

Рівняння балансу імпульсу суміші (14) містить тензор дифузійного напруження (19). Цей тензор, зазвичай, інтерпретують як міру дифузійної (незалежної від руху суміші) швидкості обміну імпульсом компонент через поверхню, що рухається разом з сумішшю. Легко переконатися, з використанням (26), що в розглядуваному випадку цей тензор приймає вигляд

$$\hat{T}_{D1} = \rho_1 \vec{u}_1 \vec{u}_1 = -\rho \frac{D^2}{d(x-d)} \vec{i}\,\vec{i} \,, \tag{30}$$

а тому

$$\hat{T}_{D1}(x \to d) \to \infty. \tag{31}$$

Важко надати фізичну інтерпретацію такій величині.

Зазначимо також, що неочевидною є фізична інтерпретація тензора парціальних напружень $\hat{T}_\alpha$. Це є наслідком труднощів феноменологічного опису силової дії на компоненти суміші. У результаті виникають проблеми з формулюванням граничних умов, в які входять сили, оскільки невідомо як поділити силу сумарну на сили парціальні [3].

Проблематичною є інтерпретація енергії дифузії компоненти (20), яка в розглядуваному випадку є такою

$$u_{D1} = \frac{1}{2} \vec{u}_1 \cdot \vec{u}_1 = \frac{1}{2} \frac{D^2}{(x-d)^2} . \tag{32}$$

Оскільки

$$u_{D1}(x \to d) \to \infty, \tag{33}$$

то важко у величині, яка характеризується такою особливістю, дошукуватися фізичного сенсу.

Варто зауважити, що оскільки внутрішня енергія є сумою енергії теплового руху й енергії зв’язків, то так само надання фізичного сенсу частковій внутрішній енергії u_α компонент суміші не є очевидним (переважно внаслідок складності зв'язків між молекулами суміші). Енергію теплового руху можемо пов'язати з частинками окремих компонент, однак не зрозуміло, яким чином розділити між змішаними частинками різних компонент енергію полів близької дії [4].

Виключення зі співвідношень (19) і (20) складної для інтерпретації дифузійної швидкості $\vec{u}_\alpha$ і заміна її на дифузійний потік маси $\vec{j}_\alpha$ (такий, що має фізичний сенс), дозволяє записати їх відповідно в альтернативному, значно простішому для аналізу вигляді

$$\hat{T}_{D\alpha} = \frac{\vec{j}_\alpha \vec{j}_\alpha}{\rho_\alpha}, \tag{34}$$

$$u_{D\alpha} = \frac{1}{2}\frac{\vec{j}_\alpha \cdot \vec{j}_\alpha}{\rho_\alpha}. \tag{35}$$

Враховуючи формулу (24), отримуємо, що

$$\rho_1 = \rho c_1 = \rho\left(-\frac{x}{d}+1\right), \tag{36}$$

звідки

$$\rho_1(x \to d) \to 0, \tag{37}$$

а тому особливості (31) і (33), що виникають завжди при прямуванні густини компоненти до нуля (випадок, який часто реалізується в граничних задачах) не зникають.

Варто зазначити, що введення дифузійної швидкості (5) має ще інші важливі наслідки, пов'язані із формулюванням конститутивних рівнянь, які визначають дифузійні потоки маси в сумішах з більшою ніж три кількістю компонент. Якщо для прикладу розглянути пористий матеріал, що складається з нерухомого скелету C_1, пор заповнених сухим повітрям C_2 і водяною парою C_3, то моделюючи його сумішшю з трьох компонент, одержимо таку бароцентричну швидкість

$$\vec{v} = c_2\vec{v}_2 + c_3\vec{v}_3, \quad \vec{v}_1 \equiv \vec{0}, \tag{38}$$

а також дифузійні швидкості його компонент

$$\vec{u}_1 = -\vec{v}, \quad \vec{u}_2 = \vec{v}_2 - \vec{v}, \quad \vec{u}_3 = \vec{v}_3 - \vec{v}. \tag{39}$$

Як наслідок, вектори дифузійних потоків маси компонент такої суміші відповідно будуть

$$\vec{j}_1 = -\rho_1\vec{v}, \quad \vec{j}_2 = \rho_2\vec{u}_2, \quad \vec{j}_3 = \rho_3\vec{u}_3. \tag{40}$$

Слід також зазначити, що хоча в розглядуваному випадку компонента C_1 не рухається відносно нерухомої системи відліку, однак вона рухається з дифузійною швидкістю $\vec{u}_1 \neq \vec{0}$ відносно тимчасового центру маси суміші. Наслідком такого факту є необхідність формулювання таких конститутивних рівнянь для векторів $\vec{j}_2$ і $\vec{j}_3$, які задовольнятимуть умову

$$\vec{j}_2 + \vec{j}_3 = -\vec{j}_1 = \rho_1 \vec{v}. \tag{41}$$

На практиці виконання наведеної вище умови є проблемним. Якби в розглядуваному випадку скелет рухався з швидкістю $\vec{v}_1$ (не був нерухомий), то необхідно було б додатково сформулювати конститутивне рівняння для визначення вектора $\vec{j}_1 = \rho_1 \vec{u}_1$ (що з практичної точки зору було б завданням досить дивним).

Якщо розглядуваний матеріал трактувати як пористу матрицю, пори якої заповнені вологим повітрям, яке моделюється як двокомпонентна суміш, то уникається проблема, що виникає з необхідності виконання умови (41), оскільки в цьому випадку вона приймає вигляд (12). При такій моделі матеріалу можна успішно використовувати закон Фіка. Таким чином бачимо, що моделювання багатокомпонентних матеріалів у наближенні суміші є не завжди прийнятним, зокрема, при використанні дифузійної швидкості.

Висновки. З проведеного вище аналізу випливає, що:

- у випадку двокомпонентних сумішей, у яких дифузію описує закон Фіка, дифузійна швидкість (означена формулою (5)) зростає необмежено ($\vec{u}_\alpha \to \infty$), якщо густина компоненти зменшується до нуля ($\rho_\alpha \to 0$). Такої особливості позбавлений добуток густини компоненти та її швидкості, тобто вектор дифузійного потоку маси $\vec{j}_\alpha$. Тому всі складові в рівнянні дифузії мають зрозумілу фізичну інтерпретацію;
- подання (5) полегшує формальний аналіз сумішей і дозволяє отримати для них балансові рівняння у вигляді, аналогічному до відповідних рівнянь матеріального континууму. Однак при цьому значно утруднюється фізичний аналіз складових, які містять добутки дифузійної швидкості, тобто тензора дифузійних напружень $\hat{T}_{D\alpha}$ чи енергії дифузії $u_{D\alpha}$;
- у випадку сумішей із більшою кількістю компонент виникає проблема формулювання конститутивних рівнянь для $\vec{j}_\alpha$.

Література

[1] *Бурак Я. Й.* Вибрані праці. — Львів: ЦММ ІППММ ім. Я. С. Підстригача НАН України, 2001. — 352 с.

[2] *Milis A. F.* The use of the diffusion velocity in conservation equations for multicomponent gas mixtures // Int. J. Heat Mass Transfer. — 1998. — № 41. — С. 1955-1968.

[3] *Rajagopal K. R., Wineman A. S., Gandhi M. V.* On boundary conditions for a certain class of problems in mixture theory // Int. J. Eng. Sci. —1986. — № 24. — С. 1453-1463.

[4] *Rutkowski J.* Podstawy bilansowania masy, pędu, energii i entropii. — Warszawa: Wydawnictwa Politechniki Warszawskiej, 1976.

[5] *Truesdell C.* Rational Thermodynamics. — New York: Springer-Verlag, 1984.
[6] *Williams W. O.* On stresses in mixtures // Arch. Rational Mech. Anal. — 1979. — № 70. — C. 251-260.
[7] *Wyrwał J.* Termodynamiczne podstawy fizyki budowli. — Opole: Oficyna Wydawnicza Politechniki Opolskiej, 2004.

К проблеме физической интерпретации тензора диффузионных напряжений и кинетической энергии диффузии

Ежы Вырвал

На примере двухкомпонентной смеси обсуждаются проблемы, связанные с физической интерпретацией выражений, содержащих диффузионную скорость компонент. Такие выражения выступают в уравнениях баланса количества движения и энергии смеси. Показано, что следствием определения диффузионной скорости, как разности скоростей компоненты и центра масс являются трудности, связанные с физической интерпретацией тензора диффузионных напряжений (в балансе количества движения) и кинетической энергии диффузии (в балансе энергии). Простую физическую интерпретацию имеет только произведение плотности компоненты и её диффузионной скорости, т. е. плотность диффузионного потока массы. Показано, что при наличии более чем двух компонент возникают трудности в формулировке конституционных уравнений, определяющих диффузионные потоки массы.

On the Problems with Physical Interpretation of the Diffusion Stress Tensor and Kinetic Diffusion Energy

Jerzy Wyrwał

The problems with physical interpretation of mathematical expressions containing diffusive velocity term of a component are presented basing on the two-component mixture example. Such expressions one can meet in the momentum balance and energy equations for the mixture. It is shown, that as a result of definition of that velocity as a difference between velocity of a component and velocity of mass center the problems arise concerned with physical interpretation of diffusion stress tensor and kinetic energy of diffusion. An easy interpretation has only a product of component density and its diffusion velocity (defining a density of mass diffusion flux), occurring in mass balance equation It is also shown that problems concerned the formulation of constitutive equations describing diffusion fluxes of mass arise in case of mixtures consisting of more than two components.

Отримано 15.02.06