

Objektív anyagfüggvények felé a reológiában

Ván Péter

KFKI Részecske- és Magfizikai Kutatóintézet, Elméleti Fizika Főosztály. vpet@rmki.kfki.hu

ÖSSZEFOGLALÁS: A nemrelativisztikus téridő model 4 dimenziós formalizmusának segítségével kiszámított objektív időderiváltak termodinamikai elméletbe történő illesztését vizsgáljuk. Segítségükkel nemegyensúlyi termodinamikai keretek között levezetjük a reológia alap-egyenleteit. Tiszta nyírás esetén kiszámoljuk a viszkometrikus függvényeket.

Kulcsszavak: objektív időderiváltak, reológia, tiszta nyírás

1 OBJEKTÍV IDŐDERIVÁLTAK

Ván és Asszonyi (2006)-ban megadtunk egy termodinamikailag megalapozott reológiai egyenletrendszer, de az objektivitás követelményét, azaz a kapott anyagi relációk (függvények és differenciálegyenletek) vonatkoztatási rendszer függetlenségét csak félig-meddig vettük figyelembe. Ebben az írásban az objektivitási követelményt felhasználó változatot adunk meg, tekintettel egy rendes, téridő modellekre épített mechanika felépítésére. Az abszolút időderiváltak nem relativisztikus téridő modell keretei között kapott formáját használjuk a reológiai egyenletek származtatására. A célunk megmutatni az abszolút időderiváltaknak a második főtételben játszott szerepét.

Matolcsi és Ván (2007) megadja az anyagi időderiváltak (Lie deriváltak) adott külső inerciális vonatkoztatási rendszerben észlelt formáit különböző tenzori rendű fizikai mennyiségekre. A négydimenziós téridőn értelmezett (nem relativisztikus!) négyes mennyiségekre alapozott tárgyalás néhány fontos következményét az alábbiakban tömören megismételjük.

A hagyománytól eltérően jelentős szerepe van annak, hogy megkülönböztessük a vektorokat a duális tér elemeitől, a kovektoroktól. Második tenzori rendig bezáróan megkülönböztetünk skalár, vektor, kovektor, tenzor, kotenzor, és kontra-kovariáns vegyes tenzor jellegű fizika mennyiségeket. A szokásos hármas vektorok és tenzorok a megfelelő négy dimenziós mennyiségek térszerű komponensei. A deriválások átvisznek a duális térbe, tehát skalár deriváltja kovektor és nem vektor, vektor deriváltja másodrendű jobbról kovariáns vegyes tenzor, illetve kovektor deriváltja kotenzor lesz.

Példák:

- 1) A feszültség egy hármas másodrendű tenzormező $\mathbf{F} \in \mathbf{E} \otimes \mathbf{E}$. A négyesfeszültség tér-térszerű része.
- 2) A mozgásfüggvény négyesvektorának deriváltjaként kapjuk a négyes mozgásgradienst (adott inerciális vonatkoztatási rendszerben)

$$\mathbf{Y}_t = D_R(t, \chi_t) = \begin{pmatrix} 1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{v} & \nabla_R \chi_t \end{pmatrix},$$

ahol $\nabla_R \chi_t = \mathbf{H}_t$ a szokásos hármas mozgásgradiens, a mozgásfüggvény anyagi változóiban vett deriváltja (lásd például Ván és Asszonyi 2006, 29-32. o.). A négyes mozgásgradiens jobbról kovariáns vegyes másodrendű négyestenzor, a szokásos mozgásgradiens jobbról kovariáns vegyes másodrendű hármas tenzor $\mathbf{H}_t \in \mathbf{E} \otimes \mathbf{E}^*$.

Az anyagi időderiváltak a közeg szerinti deriváltak, azaz *Lie-deriváltak*. A Lie-deriváltak a természetes matematikai eszköz a fizikai mennyiség változásának a közeg mozgásától történő elválasztására. Használatuk (tudatosan, vagy implicit módon) széles körben elterjedt a mechanikai szakirodalomban. Például skalár értékű mező négyes Lie-deriváltja az a szokásos szubsztanciális derivált. A Lie-derivált csak a közeg mozgására vonatkozó információkat tartalmaz, sok esetben felírható olyan alakban, hogy csak a közeg adott vonatkoztatási rendszerben leírt mozgására jellemző mennyiségeket tartalmaz, és expliciten nem szerepelnek benne a leírásra használt vonatkoztatási rendszer mozgásának paraméterei. Adott mező Lie-deriváltjának formája viszont különbözik a különböző típusú vektorokra és tenzorokra, illetve speciális a formája magát a közeg mozgását leíró mezőkre (sebességmező, sebességgradiens).

Megjegyzés: egy mező vonatkoztatási rendszertől független, tehát objektív deriváltja általában a *kovariáns derivált*. A kovariáns deriváláshoz nem kell közeg. A kovariáns derivált adott vonatkoztatási rendszerben érvényes alakja viszont tartalmazhat a vonatkoztatási rendszer mozgására vonatkozó információkat is (pl. a forgó megfigyelő szögsebességét).

Egy $\mathbf{A}$ jobbról kovariáns vegyes másodrendű hármas tenzormező anyagi időderiváltjának (az anyag mozgásmezője szerinti Lie deriváltjának) térszerű része a $\mathbf{v}$ sebességmezővel jellemzett kontinuumban:

$$(1) \quad \mathbf{A}^\diamond = \dot{\mathbf{A}} - \nabla \mathbf{v} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \nabla \mathbf{v}.$$

Itt a pont a szubsztanciális deriváltat jelöli.

Ha a sebességmező nem időfüggő, akkor a jobbról kovariáns vegyes másodrendű hármastenzorok anyagi időderiváltja térszerű. Viszont a mozgással kapcsolatos mennyiségek speciálisak. Például a mozgásgradiens mezőre (azaz a mozgásgradiensre lokális változóiban) alkalmazva a fenti formulát azt kapjuk, hogy

$$\mathbf{H}^\diamond = \dot{\mathbf{H}} - \nabla \mathbf{v} \cdot \mathbf{H} + \mathbf{H} \cdot \nabla \mathbf{v} = \dot{\mathbf{H}}.$$

mert $\nabla \mathbf{v} = \dot{\mathbf{H}}\mathbf{H}^{-1}$ és mert mindig a pillanatnyi konfiguráció a referencia konfiguráció, azaz a megfelelő anyagi mennyiségeknek a $t=0$ időpontban felvett értékét kell használnunk (tehát $\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 = \mathbf{I}_R$, illetve $\mathbf{H}^{-1} = \mathbf{I}_r$ helyettesítéssel élünk, ahol $\mathbf{I}_R$ és $\mathbf{I}_r$ az anyagi és a lokális egységtenzor).

A másik fontos példánk a sebességgradiens anyagi időderiváltja

$$(2) \quad (\nabla \mathbf{v})^\diamond = \nabla(\dot{\mathbf{H}}\mathbf{H}^{-1})^\diamond = \dots = \nabla \dot{\mathbf{v}} - \nabla \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v}.$$

vagyis a sebességgradiens anyagi deriváltja a szubsztanciális derivált, mínusz a sebesség négyzete, mert a további tagok kiejtik egymást.

Az $\mathbf{L}$ másodrendű hármastenzor időderiváltja általában térszerű és felsőáramlásos deriváltnak nevezzük.

$$(3) \quad \mathbf{L}^\diamond = \dot{\mathbf{L}} - \nabla \mathbf{v} \cdot \mathbf{L} - \mathbf{L} \cdot (\nabla \mathbf{v})^T.$$

Itt a T index a transzponálás jele.

A továbbiakban felvázoljuk, hogyan jelentkeznek ezek a deriváltak egy termodinamikai elmélet keretein belül, eljutunk a reológiai egyenletek egy új alakjához és megadjuk a kapott egyenleteket egyszerű nyírás esetén.

2 ENTRÓPIAPRODUKCIÓ

A szokásos hármas mennyiségeken alapuló levezetés ugyan nem vonatkoztatási rendszer független, de egyszerűsítésünk stacionárius esetben nem okoz hibát (lásd Ván 2005).

Az entrópiaprodukciónak a kiszámításához azt kell figyelembe vennünk, hogy az entrópia anyagfüggvény. Skalár értékű függvény, de a megfelelő mezők függvénye. Tehát anyagi időderiváltját kell képeznünk az entrópiaprodukciónak a kiszámításánál. Tegyük fel, hogy a lokális egyensúlyon túli kontinuum belső állapotát a belső energia, a mozgásgradiens, illetve egy vele teljesen azonos tenzori rendű belső változó határozza meg, ekkor

$$\dot{s}(e, \mathbf{H}, \boldsymbol{\xi}) = \frac{\partial s}{\partial e} e^\diamond + \frac{\partial s}{\partial \mathbf{H}} \mathbf{H}^\diamond + \frac{\partial s}{\partial \boldsymbol{\xi}} \boldsymbol{\xi}^\diamond.$$

Ennek megfelelően az entrópiaprodukciónak a levezetésének [Ván & Asszonyi (2006)]-ban megadott lépéseit teljesen megismételhetjük, és az eredmény látszólag keveset változik, hiszen a mozgásgradiens és a belső energia objektív időderiváltja (Lie deriváltja) a szubsztanciális derivált $\mathbf{H}^\diamond = \dot{\mathbf{H}}$ illetve $e^\diamond = \dot{e}$:

$$T\sigma_s = \frac{1}{T} \mathbf{q} \cdot \nabla T + \left(\mathbf{F} + \rho T \mathbf{H} \frac{\partial s}{\partial \mathbf{H}} \right) : \dot{\mathbf{H}} \mathbf{H}^{-1} - \rho \frac{\partial s}{\partial \boldsymbol{\xi}} \boldsymbol{\xi}^\diamond \geq 0.$$

A feszültség, ami a Cauchy-egyenletben játszott szerepe alapján másodrendű tenzormező (kont-ra-kontravariáns), itt vegyes tenzormezővé válik. Tehát $\mathbf{F} \in \mathbf{E} \otimes \mathbf{E}^*$, koordinátáiban $F_k^i = \delta_{kj} F^{jk}$. Ez azért van, mert a belső energiát a teljes energia és a kinetikus energia különbségeként írtuk fel, tehát $s(e_T - \mathbf{v}^2/2, \mathbf{H}, \boldsymbol{\xi})$. Az entrópiaprodukciónak a kiszámításakor ennek a sebesség szerinti deriváltját is kell képeznünk és a sebességnégyzetből áttevődik a ko-kontra azonosítás (Ván 2005). Ezért a zárójeles viszkózus feszültségben a két tag összeadható. Viszont, a Lie-deriválás - mivel az indexelhúzás konstans lineáris leképezés - a feszültségre, mint térszerű tenzorra hat.

Ennek megfelelően az Onsageri vezetési egyenletek a következők

$$(4) \quad \mathbf{F}^\nu = \left(\mathbf{F} + \rho T \mathbf{H} \frac{\partial s}{\partial \mathbf{H}} \right) = \mathbf{L}^1 \nabla \mathbf{v} - \mathbf{L}^{12} \rho \boldsymbol{\xi},$$

$$(5) \quad \boldsymbol{\xi}^\diamond = \mathbf{L}^{21} \nabla \mathbf{v} - \mathbf{L}^2 \rho \boldsymbol{\xi}.$$

Itt $\mathbf{F}^\nu$ a viszkózus feszültség. Ennek az egyenletnek az általános megoldása a $\boldsymbol{\xi}$ dinamikai változó kiküszöbölésével, állandó sűrűséget feltételezve:

$$(6) \quad (\mathbf{F}^\nu)^\diamond - \rho \mathbf{L}^{12} \mathbf{L}^2 (\mathbf{L}^{12})^{-1} \mathbf{F}^\nu = \mathbf{L}^1 (\nabla \mathbf{v})^\diamond + \rho (\mathbf{L}^{12} \mathbf{L}^2 (\mathbf{L}^{12})^{-1} \mathbf{L}^1 - \mathbf{L}^{12} \mathbf{L}^{21}) \nabla \mathbf{v}.$$

Indexekkel is kiírjuk a fenti képletet:

$$\begin{aligned} & (\mathbf{F}^\nu)_{ij}^\diamond - \rho L_{ijkl}^{12} L_{klmn}^2 (L^{12})_{mnop}^{-1} (\mathbf{F}^\nu)_{op} = \\ & L_{ijkl}^1 (\partial_l v_k)^\diamond - \rho L_{ijkl}^{12} L_{klmn}^{21} \partial_n v_m + \rho L_{ijkl}^{12} L_{klmn}^2 (L^{12})_{mnop}^{-1} L_{oprs}^1 \partial_s v_r. \end{aligned}$$

Az izotrópiát ezen a ponton vesszük figyelembe, felhasználva, hogy egy általános negyedrendű izotróp tenzor három független anyagállandót tartalmaz. Indexesen felírva az általános alakot:

$$\begin{aligned} L_{ijkl} &= \hat{l}_1 \delta_{ik} \delta_{jl} + \hat{l}_2 \delta_{il} \delta_{jk} + \hat{l}_3 \delta_{ij} \delta_{kl} = \\ &= l_1 \left(\frac{1}{2} (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) - \frac{1}{3} \delta_{ij} \delta_{kl} \right) + \frac{l_2}{2} (\delta_{ik} \delta_{jl} - \delta_{il} \delta_{jk}) + \frac{l_3}{3} \delta_{ij} \delta_{kl} = \\ &= l_1 S_{ijkl}^0 + l_2 A_{ijkl} + l_3 E_{ijkl}. \end{aligned}$$

A második egyenlőségben a tenzor hatását célszerűen csoportosítottuk, leolvasható, hogyan hat a fenti negyedrendű tenzor egy másodrendűre. Ezt jelöltük az utolsó egyenlőségben röviden: az $\mathbf{S}^0$ első tag szimmetrizál és nyomtalanít, az $\mathbf{A}$ második tag antiszimmetrizál, az $\mathbf{E}$ harmadik pedig az egységtenzorral arányos részt képez. Az $\mathbf{S}^0 = \mathbf{S} - \mathbf{E}$, $\mathbf{A}$ és $\mathbf{E}$ tenzorok között érvényesek a következő azonosságok:

$$\begin{aligned} \mathbf{A} : \mathbf{E} &= \mathbf{E} : \mathbf{A} = \mathbf{0}, & A_{ijmn} E_{mnkl} &= 0_{ijkl}, \\ \mathbf{S} : \mathbf{A} &= \mathbf{A} : \mathbf{S} = \mathbf{0}, & A_{ijmn} S_{mnkl} &= 0_{ijkl}, \\ \mathbf{S} : \mathbf{E} &= \mathbf{E} : \mathbf{S} = \mathbf{E}, & E_{ijmn} S_{mnkl} &= E_{ijkl}, \\ \mathbf{S}^0 : \mathbf{E} &= \mathbf{E} : \mathbf{S}^0 = \mathbf{0}, & S_{ijmn}^0 E_{mnkl} &= 0_{ijkl}, \\ \mathbf{S}^0 : \mathbf{A} &= \mathbf{A} : \mathbf{S}^0 = \mathbf{0}, & S_{ijmn}^0 A_{mnkl} &= 0_{ijkl}, \\ \mathbf{E} : \mathbf{E} &= \mathbf{E}, \quad \mathbf{A} : \mathbf{A} = \mathbf{A}, \quad \mathbf{S} : \mathbf{S} = \mathbf{S}, \quad \mathbf{S}^0 : \mathbf{S}^0 = \mathbf{S}^0. \end{aligned}$$

Ennek megfelelően bevezethetjük az $\mathbf{L}^1$, $\mathbf{L}^2$, $\mathbf{L}^{12}$ és $\mathbf{L}^{21}$ negyedrendű tenzorokra a következő jelöléseket:

$$\begin{aligned} \mathbf{L}^1 &= l_1 \mathbf{S}^0 + k_1 \mathbf{A} + m_1 \mathbf{E}, \\ \mathbf{L}^{12} &= l_{12} \mathbf{S}^0 + k_{12} \mathbf{A} + m_{12} \mathbf{E}, \\ \mathbf{L}^{21} &= l_{21} \mathbf{S}^0 + k_{21} \mathbf{A} + m_{21} \mathbf{E}, \\ \mathbf{L}^2 &= l_2 \mathbf{S}^0 + k_2 \mathbf{A} + m_2 \mathbf{E}. \end{aligned}$$

Itt nem írtuk ki az összes megfelelő indexes alakot. Ez a forma azért célszerű, mert a fenti azonosságok miatt így könnyű az inverzet számolni. Pl.

$$\mathbf{L}_{12}^{-1} = \frac{1}{l_{12}} \mathbf{S}^0 + \frac{1}{k_{12}} \mathbf{A} + \frac{1}{m_{12}} \mathbf{E}.$$

Ekkor a fenti (6) vezetési egyenlet (figyelem, reciprocitási relációkat nem tételeztünk fel) három független komponensre esik szét, a nyom nélküli szimmetrikus, antiszimmetrikus és a diagonális komponensek egymással nem csatolódnak. Az együtthatókat átnevezve a [Ván & Asszonyi (2006)] 65-66. oldalakon történő jelölésekhez hasonlóan kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} (7) \quad \tau_1 (\mathbf{F}^\diamond)^{S0} + \mathbf{F}^{S0} &= 2\eta_1 (\tau_{1d} (\gamma^\diamond)^{S0} + \gamma^{S0}), \\ (8) \quad \tau_2 (\mathbf{F}^\diamond)^A + \mathbf{F}^A &= 2\eta_2 (\tau_{2d} (\gamma^\diamond)^A + \gamma^A), \\ (9) \quad \tau_3 tr(\mathbf{F}^\diamond) + tr \mathbf{F} &= 2\eta_3 (\tau_{3d} tr(\gamma^\diamond) + tr \gamma). \end{aligned}$$

Itt $\gamma = \nabla \mathbf{v}$ a sebességgradienst jelöli, elhagytuk a $\mathbf{F}^v$ viszkózus feszültség jelöléséből a felső v indexet és az $S0$, A felső indexek pedig a megfelelő tenzor szimmetrikus nyom nélküli és antiszimmetrikus részeit jelölik. A továbbiakban megoldjuk a fenti egyenletrendszer egy konkrét áramlási kép esetén.

3 STACIONÁRIUS EGYSZERŰ NYÍRÁS

Ezt az esetet tárgyalja például (Verhás 1986 137-138. oldal, illetve Bird et. al. 1977, 139-148 oldal) többféle modell és objektív időderivált segítségével elemzi a kísérleti eredményeket. Az egyszerű nyírás a reológiai egyenletek tesztelésének egyik alapkísérlete.

Az anyag mozgását a következő sebességgradiens tenzor jellemzi:

$$\gamma = \begin{pmatrix} 0 & \kappa & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Az $\mathbf{F}$ feszültség Lie-deriváltja ebben a konkrét esetben:

$$\mathbf{F}^\diamond = \dot{\mathbf{F}} - \mathbf{F}\gamma^T - \gamma\mathbf{F} = \dot{\mathbf{F}} - \kappa \begin{pmatrix} f_{12} + f_{21} & f_2 & f_{23} \\ f_2 & 0 & 0 \\ f_{32} & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Itt az f_{ij} stb. jelölés a feszültség komponenseit jelöli. A sebességgradiens Lie-deriváltja (2) alapján, figyelembe véve a sebességmező fenti alakját:

$$\gamma^\diamond = \dot{\gamma} - \gamma^2 = \dot{\gamma}.$$

Ezeket az összefüggéseket behelyettesítve a fenti (7)-(9) egyenletekbe, a stacionárius megoldásra (időderiváltak nullák) komponensenként a következő egyenletrendszer adódik. (7)-ből:

$$\begin{aligned} f_{13} + f_{31} &= 0, & f_{32} + f_{23} &= 0, & f_3 &= f_2, \\ f_{12} + f_{21} &= 2\eta_1\kappa + 2\kappa\tau_1 f_2, \\ f_1 &= 2\eta_1\kappa^2\tau_1 + f_2(1 + 2\kappa^2\tau_1^2). \end{aligned}$$

(8) következtében:

$$f_{12} - f_{21} = 2\eta_2\kappa, \quad f_{31} + f_{13} = 0, \quad f_{23} = f_{32}.$$

(9)-ből pedig

$$f_1 = -f_2 - f_3 + (f_{12} + f_{21})\kappa.$$

Ebből az egyenletrendszerből az adott áramlási képet fenntartó feszültség meghatározható, az egyenletrendszer megoldható:

$$\begin{aligned} f_{13} &= f_{31} = f_{32} = f_{23} = 0, \\ f_2 &= f_3 = \frac{2\eta_1\kappa^2(\tau_1 - \tau_3)}{3 + 2\kappa^2\tau_1(\tau_1 - \tau_3)}, \\ f_{12} &= f_{21} + 2\eta_2\kappa = \frac{3\eta_1\kappa}{3 + 2\kappa^2\tau_1(\tau_1 - \tau_3)} + \eta_2\kappa. \end{aligned}$$

Ezekből a feszültségértékekből a jellemző viszkometrikus függvények a következők:

$$\begin{aligned} \hat{\eta} &= \frac{f_{12}}{\kappa} = \frac{3\eta_1}{3 + 2\kappa^2\tau_1(\tau_1 - \tau_3)} + \eta_2, \\ \Psi_1 &= \frac{f_1 - f_2}{\kappa^2} = \frac{6\eta_1\tau_1}{3 + 2\kappa^2\tau_1(\tau_1 - \tau_3)}, \\ \Psi_2 &= \frac{f_2 - f_3}{\kappa^2} = 0. \end{aligned}$$

Az eredményeket röviden összevetjük a Verhás-Jeffreys modell eredményeivel és a kísérletekkel is.

- A $\dot{\gamma}$ viszkozitás Ostwald-szerű.
- A nyomás nem szimmetrikus. A méréseknél ezt nem tapasztalják (de úgy tűnik nem is mérik).
- A harmadik viszkometrikus függvény a mérések szerint kicsi, de nem pontosan nulla. A Verhás-Jeffreys modellnél fele az elsőnek, ami annak egyik fő hibája.

4 KÖVETKEZTETÉSEK

A kísérletekkel történő egyezés még kvalitatíve sem teljes, de bizonyos mértékig javítja a tiszta korotációs Verhás-Jeffreys modell eredményeit. Ez azt mutatja, hogy az objektív mennyiségekkel felépített termodinamikai elmélet felé tett első lépésünket továbbiaknak kell követni. Nyilvánvaló hiányossága munkánknak, hogy a termodinamikai erők és áramok a szokásos módon nem egyértelműek és nem is anyagi természetűek. Ennek figyelembe vétele valószínűleg változtatni és remélhetőleg javítani fogja az eredményeket. Időfüggő eset pedig a teljes vonatkoztatási rendszertől független tárgyalást szükségessé teszi.

KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

Ezt a munkát az OTKA (T48489, T49466), az EU-I3HP pályázata illetve a szerző Bolyai ösztöndíja támogatta. Köszönet Matolcsi Tamásnak és Asszonyi Csabának vitatkozó megjegyzéseikért.

IRODALOM

- Ván P. és Asszonyi Cs. 2006. Az általános törvényszerűségek, in Izotróp kontinuumok anyag-törvénye, Mérnökgeológiai-Közetmechanikai Kiskönyvtár III., 2. fejezet, szerk. Asszonyi Csaba., Műegyetemi Kiadó, Budapest.
- Matolcsi T. és Ván P., 2007. Absolute time derivatives, *Journal of Mathematical Physics*, , **48**: 053507-19, (math-ph/0608065).
- Ván P. 2005. Abszolút termomechanika, kézirat.
- Verhás J. 1985. *Termodinamika és reológia*. Műszaki Könyvkiadó, Budapest.
- Bird, B. R., Armstrong, R. C. and Hassager, O. 1977. *Dynamics of polymeric liquids*. John Wiley and Sons, Inc. New York-Santa Barbara-etc..