Белов П.А., Лурье С.А. Вариационная формулировка градиентной необратимой термодинамики // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2023. – № 5. С. 36–44. DOI: 10.15593/perm.mech/2023.5.04

Belov P.A., Lurie S.A. Variational formulation of gradient irreversible thermodynamics. *PNRPU Mechanics Bulletin,* 2023, no. 5, pp. 36-44. DOI: 10.15593/perm.mech/2023.5.04

пермский политех

ВЕСТНИК ПНИПУ. МЕХАНИКА
№ 5, 2023
PNRPU MECHANICS BULLETIN
https://ered.pstu.ru/index.php/mechanics/index



Научная статья

DOI: 10.15593/perm.mech/2023.5.04
УДК 539.3

ВАРИАЦИОННАЯ ФОРМУЛИРОВКА ГРАДИЕНТНОЙ НЕОБРАТИМОЙ ТЕРМОДИНАМИКИ

П.А. Белов, С.А. Лурье

Институт прикладной механики Российской академии наук, Москва, Российская Федерация

О СТАТЬЕ

Получена: 28 июля 2023 г.
Одобрена: 05 сентября 2023 г.
Принята к публикации:
31 октября 2023 г.

Ключевые слова:

вариационный принцип, диссипативные процессы, диссипативная функция, каналы диссипации, законы теплопроводности, уравнения теплообмена.

АННОТАЦИЯ

Предложено развитие вариационного принципа Л.И. Седова для моделирования диссипативных процессов. Сформулированный вариационный принцип дает возможность по известной модели обратимого процесса (известному лагранжиану) строить диссипативные модели, добавляя необходимое количество каналов диссипации. Каналами диссипации названы неинтегрируемые вариационные формы, линейные по вариациям аргументов. Аргументами каналов диссипации являются обобщенные переменные соответствующих билинейных слагаемых лагранжиана. В качестве примеров рассматриваются вариационные модели процессов теплообмена. В работе вводится термический потенциал, который принимается за основную «кинематическую» переменную. Температура и тепловой поток определяются из выражения возможной работы, совершаемой на вариациях первых производных от термического потенциала по аналогии с механикой сплошных сред, где внутренние усилия совершают возможную работу на вариациях деформаций. Уравнения законов теплопроводности рассматриваемых моделей теплообмена получены как уравнения совместности путем исключения термического потенциала из уравнений определяющих соотношений для температуры и теплового потока. Показано, что предлагаемая процедура построения диссипативных моделей позволяет получить законы теплопроводности Фурье, Максвелла – Каттанео, Гаера – Крумхакcля, Джеффри и более общие законы теплопроводности. Для наиболее простой модели теплообмена введен единственный канал диссипации, который позволил получить уравнение теплообмена, содержащее вторые и первые производные по времени. Эта модель учитывает волновые свойства и диссипацию по диффузионному механизму. В частном случае она редуцируется к классической модели теплопроводности. Для более общих градиентных моделей теплообмена вводятся последовательно дополнительные каналы диссипации. В соответствии с дифференциальным порядком уравнения баланса тепла, вариационный метод позволяет формулировать согласованный спектр граничных условий в каждой неособенной точке поверхности. Кроме того, для краевой задачи по времени вариационный принцип определяет пары альтернативных условий в начальном и конечном моментах времени рассматриваемого процесса.

© ПНИПУ

© **Белов Петр Анатольевич** – д. ф.-м. н., вед. науч. сотр., e-mail: BelovPA@yandex.ru, ID: 0000-0002-2584-8185.
Лурье Сергей Альбертович – д. т. н., проф., гл. науч. сотр. и рук. лаборатории в Институте прикладной механики РАН, e-mail: salurie@mail.ru, ID: 0000-0002-0706-9073.

Petr A. Below – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Leading Researcher, Institute of Applied Mechanics, e-mail: BelovPA@yandex.ru, ID: 0000-0002-2584-8185.
Sergey A. Lurie – Doctor of Technical Sciences, Professor, Professor of the Department of Mechanics of Composites, Chief Researcher and Head of the Laboratory, e-mail: salurie@mail.ru, ID: 0000-0002-0706-9073.

Эта статья доступна в соответствии с условиями лицензии Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International License (CC BY-NC 4.0)
This work is licensed under a Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International License (CC BY-NC 4.0)

VARIATIONAL FORMULATION OF GRADIENT IRREVERSIBLE THERMODYNAMICS

P.A. Belov, S.A. Lurie

Instiutute of Applied Mechanics of RAS, Moscow, Russian Federation

ARTICLE INFO

Received: 28 July 2023
Approved: 05 September 2023
Accepted for publication:
31 October 2023

Keywords:

variational principle, dissipative processes, dissipative function, dissipation channels, heat conduction laws, heat transfer equations.

ABSTRACT

This work proposes the elaboration of the variational principle of L.I. Sedov for modeling dissipative processes. The formulated variational principle makes it possible to propose the dissipative models using the known model of a reversible process (the known Lagrangian), adding the required number of dissipation channels. Dissipation channels are non-integrable variational forms that are linear in the variations of the arguments. The arguments of the dissipation channels are the generalized variables of the corresponding bilinear terms of the Lagrangian. Variational models of heat transfer processes are considered as examples. The paper introduces the thermal potential, which is taken as the main *kinematic* variable. The temperature and heat flux are determined from the expression of the possible work done on variations of the first derivatives of the thermal potential, by analogy with continuum mechanics, where internal forces do the possible work on the strain variations. The equations of heat conduction laws of the considered heat transfer models are obtained as compatibility equations by eliminating the thermal potential from the equations of constitutive relations for temperature and heat flow.

It is shown that the proposed procedure for elaboration of the dissipative models makes it possible to obtain the laws of thermal conductivity of Fourier, Maxwell – Cattaneo, Gaer – Krumhaksl, Jeffrey and more general laws of thermal conductivity. For the simplest heat transfer model, a single dissipation channel was introduced, which made it possible to obtain a heat transfer equation containing the second and first time derivatives. This model takes into account the wave properties and dissipation by the diffusion mechanism. In a particular case, it is reduced to the classical model of heat conduction. For more general gradient models of heat transfer, additional dissipation channels are sequentially introduced. In accordance with the differential order of the heat balance equation, the variational method makes it possible to formulate a consistent spectrum of boundary conditions at each non-singular point of the surface. In addition, for a boundary value problem in time, the variational principle determines pairs of alternative conditions at the initial and final times of the process under consideration.

© PNRPU

Введение

Известно, что при решении в перемещениях вариационный принцип Лагранжа для обратимых процессов записывается в виде:

$$\delta L = \delta(A - U),$$

здесь L – лагранжиан, A – работа сил, заданных в объеме и на поверхности тела, а U – потенциальная энергия.

Достаточными условиями обратимых процессов являются формулы Грина, которые позволяют построить энергетически согласованные определяющие соотношения.

Наряду с обратимыми, рассмотрим и необратимые процессы. В этом случае линейная вариационная форма возможной работы внутренних силовых факторов не интегрируема, и, следовательно, множители при вариациях кинематических переменных в линейной форме $\overline{\delta U_V}$ не выражаются через производные от некоторого потенциала (плотности потенциальной энергии). При этом они являются некоторыми непрерывными функциями кинематических переменных. Для необратимых процессов вариационный принцип предложен Л.И. Седовым и учениками [1–5]. Соответствующее вариационное уравнение для динамических процессов записывается в виде

$$\delta I - \delta W^* = 0, \qquad (1)$$

где $I = A_V + K_V - U_V$, A_V – объёмная плотность работы внешних объёмных сил, K_V – объёмная плотность кинетической энергии, U_V – объёмная плотность потенциальной энергии деформации, δW^* – линейная форма относительно вариаций кинематических переменных, которая учитывает необратимые процессы. Считаем в дальнейшем, что список кинематических переменных для диссипативной части линейной вариационной формы совпадает со списком кинематических переменных вариационной формы для обратимой части энергии (потенциальной энергии и кинетической энергии). В работах [5–10], пожалуй, впервые осуществлены попытки реализации метода линейных неинтегрируемых вариационных форм для моделирования диссипативных процессов деформирования. В настоящей работе этот подход развивается для процессов деформирования, рассматриваемых в рамках градиентных моделей общего вида, для связных термодинамических процессов, процессов теплопереноса. Делается попытка формализовать процедуру построения диссипативной вариационной формы в принципе Л.И. Седова [3].

Полагаем, что величины, входящие в выражение (1), получены интегрированием соответствующих

объемных плотностей по объему тела V и по промежутку времени от момента t_0, соответствующего начальной конфигурации до момента времени t_1, соответствующего конечной конфигурации. Отметим, что величина δW^* может содержать как интегралы по объему, так и по поверхности F, ограничивающей объём тела, занимаемого средой. В общем случае под интегралом по объему будем понимать интеграл $\int [...] d\bar{V} = \int\limits_{t_0}^{t_1} \int\limits_{V} [...] dV dt$. Аналогичным образом определяется интеграл по поверхности.

1. Определение каналов диссипации

При анализе общей структуры вариационной формы δW^* можно использовать символьную форму записи, которая позволяет несколько упростить запись исследуемых выражений. Для этого введем мультииндексы для объемной и поверхностной частей линейной формы. Положим, что мультииндексы a, b и c пробегают значения от 1 до N (по числу тензорных кинематических переменных). Тогда вариационная форма запишется в следующем виде:

$$\overline{\delta U} = \int P_a \delta Q_a d\bar{V}, \tag{2}$$

где Q_a – тензорные кинематические переменные, P_a – силовые переменные, совершающие возможную работу на вариациях соответствующих кинематических переменных Q_a. Например, под величиной Q_a может пониматься тензор второго ранга ε_{ij} и/или тензор третьего ранга $\varepsilon_{ij,k}$. Верхняя черта в $\overline{\delta U}$ указывает, что соответствующая вариационная форма (2) может быть в общем случае неинтегрируемой.

Равенство (1) может быть обобщено, когда вариационная форма определяет вариацию объемной и поверхностной энергии (необратимой здесь):

$$\overline{\delta U} = \int\limits_V P_a^V \delta Q_a dV + \int\limits_F P_a^F \delta Q_a dF. \tag{3}$$

Тогда Q_a и P_a^V, P_a^F – тензорные обобщенные кинематические и силовые переменные, соответственно в объёме и на поверхности среды.

Время t при таком рассмотрении является параметром. Поэтому в список определяющих параметров Q_a в линейных формах (2), (3) следует включать и производные по времени от кинематических переменных различной тензорной размерности – обобщенные скорости. Например, тензор деформаций ε_{ij} и тензор скоростей деформаций $\dot{\varepsilon}_{ij}$ являются различными обобщенными переменными Q_a и Q_b, $Q_a \neq Q_b \quad a \neq b$.

Диссипативные процессы будем моделировать с использованием вариационного подхода, привлекая достаточные условия неинтегрируемости возможной работы внутренних силовых факторов. Условия неинтегрируемости формы (2) будут иметь вид:

$$\frac{\partial P_a}{\partial Q_b} - \frac{\partial P_b}{\partial Q_a} = 2\bar{C}_{ab}(Q_c), \qquad \bar{C}_{ba} = -\bar{C}_{ab}. \tag{4}$$

Таким образом, для необратимых процессов параметры $\bar{C}_{ab}$ в определяющих соотношениях несимметричны по мультииндексам, в то время как для обратимых процессов аналогичные параметры C_{ab} (тензоры упругих модулей) являются, очевидно, симметричными при перестановке мультииндексов.

Например, рассмотрим форму $\delta U_V = \sigma_{ij}\delta\varepsilon_{ij} + \sigma_{mn}\delta\varepsilon_{mn}$ и пусть она интегрируема, тогда $\delta U_V = \sigma_{ij}\delta\varepsilon_{ij} + \sigma_{mn}\delta\varepsilon_{mn} = (C_{ijmn}\varepsilon_{mn}\delta\varepsilon_{ij} + C_{mnij}\varepsilon_{ij}\delta\varepsilon_{mn})/2 = \delta(C_{ijmn}\varepsilon_{ij}\varepsilon_{mn})/2$. С другой стороны, если имеется форма $(\varepsilon_{mn}\delta\varepsilon_{ij} - \varepsilon_{ij}\delta\varepsilon_{mn})$, то для нее нельзя построить потенциал и, следовательно, такая форма является неинтегрируемой.

Равенства (4) можно переписать с учетом интегрируемых составляющих:

$$\frac{\partial P_a}{\partial Q_b} = C_{ab}(Q_c) + \bar{C}_{ab}(Q_c), \tag{5}$$

где $C_{ba} = C_{ab}$ – тензор упругих модулей для обратимых процессов.

Для обратимых процессов следует принять $\bar{C}_{ab} = 0$. Тогда равенства (5) переходят в необходимые условия интегрируемости линейной формы δU_V. Учет величин $\bar{C}_{ab} \neq 0$ приводит к неинтегрируемости линейной формы (2). Для физически линейных моделей соотношения (5) могут быть проинтегрированы в явной форме и использованы для формулировки линейной формы (2) для неголономных сред непосредственно:

$$P_a = (C_{ab} + \bar{C}_{ab})Q_b. \tag{6}$$

Имея в виду определяющие соотношения (6), перепишем (2) в виде:

$$\overline{\delta U} = \int P_a \delta Q_a d\bar{V} = \int (C_{ab} + \bar{C}_{ab}) Q_b \delta Q_a d\bar{V} =$$
$$= \delta \int \frac{1}{2} C_{ab} Q_a Q_b d\bar{V} + \int \bar{C}_{ab}(Q_b \delta Q_a - Q_a \delta Q_b) d\bar{V}.$$

Сравнивая последнее равенство с вариационным уравнением Л.И. Седова для физически линейных неголономных сред, получим общий вид слагаемых в основном вариационном равенстве:

$$I = \int (P_i^V R_i - \frac{1}{2} C_{ab} Q_a Q_b) d\bar{V} + \int P_i^F R_i d\bar{F},$$

$$\delta W^* = \int \bar{C}_{ab}(Q_b \delta Q_a - Q_a \delta Q_b) d\bar{V}.$$

Вариационное уравнение Седова мы предлагаем записывать следующим образом:

$$\delta L - \overline{\delta U} = 0, \qquad L = A + K - U, \qquad \overline{\delta U} = \delta W^*. \quad (7)$$

Здесь L – лагранжиан обратимой части, A – работа внешних объёмных и поверхностных сил, K – кинетическая энергия, U – потенциальная энергия, $\overline{\delta U}$ – сумма каналов диссипации диссипативной части, где под каналом диссипации будем понимать простейшую линейную неинтегрируемую вариационную форму вида $(Q_b \delta Q_a - Q_a \delta Q_b)$. Вариационный принцип (7) дает возможность по известной модели обратимого процесса (известному лагранжиану) строить диссипативные модели, добавляя необходимое количество каналов диссипации, аргументами которых являются сомножители билинейных слагаемых лагранжиана.

Таким образом, соотношения (6), (7) дают обобщенное вариационное описание линейных моделей сред с диссипацией и в целом определяют общий алгоритм построения диссипативных моделей сред.

2. Вариационная постановка

Рассмотрим вариационную формулировку градиентной диссипативной теории упругости, для которой в соответствии с формулой (6) использованы линейные уравнения закона Гука в виде:

$$\sigma_{ij} = (C_{ijmn} + \bar{C}_{ijmn}) R_{m,n} \quad \sigma_{ijk} = (C_{ijkmnl} + \bar{C}_{ijkmnl}) R_{m,nl}. \quad (8)$$

Теорема 1. Формулировка градиентной диссипативной теории упругости.

Для процессов необратимого деформирования физически линейных сред с кинематическими переменными $R_{m,n}, R_{m,nl}$ возможная работа внутренних силовых факторов $\sigma_{ij}, \sigma_{ijk}$ представляется в виде суммы вариации функционала, соответствующего обратимой части процесса деформирования (вариации энергии, включая кинетическую и потенциальную) и суммы неинтегрируемых линейных вариационных форм, которые названы каналами диссипации и определяют процессы деформирования, связанные с диссипацией:

Доказательство. Используем (8) и перепишем выражение возможной работы силовых факторов $(\sigma_{ij} \delta R_{i,j} + \sigma_{ijk} \delta R_{i,jk})$ в виде следующей последовательности равенств:

$$\overline{\delta U} = \int (\sigma_{ij} \delta R_{i,j} + \sigma_{ijk} \delta R_{i,jk}) d\bar{V} =$$

$$= \int [(C_{ijmn} + \bar{C}_{ijmn}) R_{m,n} \delta R_{i,j} + (C_{ijkmnl} + \bar{C}_{ijkmnl}) R_{m,nl} \delta R_{i,jk}] d\bar{V} =$$

$$= \int [C_{ijmn}(R_{m,n} \delta R_{i,j} + R_{i,j} \delta R_{m,n})/2 + C_{ijkmnl}(R_{m,nl} \delta R_{i,jk} +$$

$$+ R_{i,jk} \delta R_{m,nl})] d\bar{V} + \int [\bar{C}_{ijmn}(R_{m,n} \delta R_{i,j} - R_{i,j} \delta R_{m,n})/2 +$$

$$+ \bar{C}_{ijkmnl}(R_{m,nl} \delta R_{i,jk} - R_{i,jk} \delta R_{m,nl})] d\bar{V} =$$

$$= \delta \int \frac{1}{2}(C_{ijmn} R_{m,n} R_{i,j} + C_{ijkmnl} R_{m,nl} R_{i,jk}) d\bar{V} +$$

$$+ \int [\bar{C}_{ijmn}(R_{m,n} \delta R_{i,j} - R_{i,j} \delta R_{m,n})/2 +$$

$$+ \bar{C}_{ijkmnl}(R_{m,nl} \delta R_{i,jk} - R_{i,jk} \delta R_{m,nl})] d\bar{V}. \quad (9)$$

В результате последнее из соотношений (9) является доказательством теоремы 1.

Очевидно, что утверждение теоремы обобщается и на динамические процессы, обобщенные кинематические переменные которых являются тензорными объектами различного ранга и производными по времени от этих переменных. Тогда предлагаемый здесь вариационный принцип для описания диссипативных процессов в механике деформируемых сред имеет вид (7). Очевидным является и обобщение на случай, когда диссипативные процессы определены не только в объеме, но и на поверхности тела (3).

Теорема 2. О соответствии метода каналов диссипации в необратимой термодинамике и второго закона термодинамики.

Пусть процесс деформации полностью моделируется на основе вариационного равенства (7). Тогда процесс деформирования всегда происходит с положительной диссипацией, т.е. функция диссипации всегда больше нуля $\overline{\delta U} > 0$. Выражение для каналов диссипации инвариантно по отношению к порядку слагаемых в ней.

Доказательство. Учитывая (7), запишем.

$$\overline{\delta U} = \delta(A + K - U). \quad (10)$$

Учтем, что для градиентной модели среды имеет место теорема Клапейрона $(U - K) = A/2$. Тогда равенство (10) запишется в виде

$$\overline{\delta U} = \delta(A + K - U) = \delta A / 2 > 0. \quad (11)$$

Рассмотрим далее любой возможный канал диссипации, который для линейных сред представляется как некоторая постоянная (диссипативный модуль), умноженная на соответствующую неинтегрируемую форму обобщенных координат Q_a и Q_b. Правильный знак диссипативного модуля определяется на любой частной проблеме так, чтобы моделируемый процесс соответствовал второму закону термодинамики в форме (11). Рассмотрим теперь две вариационные формы с разным порядком обобщенных производных. Пусть диссипативный модуль в вариационной форме $\int \bar{C}_{ab}(Q_b \delta Q_a - Q_a \delta Q_b) d\bar{V}$ выбран так, что она положительна $\int \bar{C}_{ab}(Q_b \delta Q_a - Q_a \delta Q_b) d\bar{V} > 0$, что соответствует (11). Наряду с этой формой рассмотрим иное, формально возможное написание вариационной формы

вида $\int \overline{C}_{ab}(Q_a\delta Q_b - Q_b\delta Q_a)d\overline{V}$. Однако, если учесть, что тензор диссипативных модулей антисимметричен $\overline{C}_{ba} = -\overline{C}_{ab}$, то получим:

$$\int \overline{C}_{ab}(Q_a\delta Q_b - Q_b\delta Q_a)d\overline{V} = -\int \overline{C}_{ab}(Q_b\delta Q_a - Q_a\delta Q_b)d\overline{V} =$$
$$= \int \overline{C}_{ba}(Q_a\delta Q_b - Q_b\delta Q_a)d\overline{V} = \int \overline{C}_{cd}(Q_d\delta Q_c - Q_c\delta Q_d)d\overline{V}.$$

Теорема 2 доказана.

3. Классическая необратимая модель теплообмена

Рассмотрим необратимые процессы теплопереноса, большой интерес к которым объясняется их большим прикладным значением. Актуальность проблемы теплообмена и интерес к ней связаны с известными попытками модифицировать классические уравнения теплопроводности для устранения противоречий классической параболической теплопроводности, а также с желанием модификации теории теплообмена для моделирования масштабных эффектов. С одной стороны, процессы теплопереноса достаточно хорошо моделируются, благодаря использованию первопринципных подходов, методов молекулярной динамики. С другой стороны, для них хорошо развиты методы экспериментальной оценки процессов теплопереноса. Поэтому вполне объяснимо, что в последнее время имеется большой интерес к изучению связных термомеханических эффектов, переходных процессов, масштабных эффектов в проблеме теплопереноса в однородных и неоднородных средах, в том числе в средах с микроструктурой [11–13].

В работе диссипативную составляющую таких процессов предлагается моделировать, используя идею введения каналов диссипации. Покажем, что известные модификации законов теплопроводности и уравнения теплового баланса могут быть построены путем введения различных каналов диссипации. Обратимая часть модели определяется некоторым термическим потенциалом и его производными по пространственным и временной координатам. Диссипативную составляющую таких процессов предлагается моделировать, используя идею введения каналов диссипации, которая, как показано выше, достаточно хорошо формализуется. Покажем, что известные модификации законов теплопроводности и уравнения теплового баланса могут быть построены путем введения «канала диссипации Фурье», и, следовательно, для исследуемых процессов может быть построена соответствующая вариационная модель. Для этого постулируем существование термического потенциала R, для которого можно построить лагранжиан обратимой части процесса теплообмена в виде:

$$L = A + K - U =$$
$$A = \int_V P^V R dV + \int_F P^F R dF,$$
$$K = \frac{1}{2}\int_V \tau\dot{R}\dot{R}dV, \qquad (12)$$
$$U = \frac{1}{2}\int_V k_V R_{,i}R_{,i}dV.$$

Для краткости при взятии по частям производных от вариаций не будем выписывать внеинтегральные члены, которые формируют граничные и начальные условия, а сосредоточимся исключительно на уравнениях теплообмена. Также для простоты будем полагать работу внешних сил равной нулю $A = 0$.

Вариация лагранжиана (12) при $A = 0$ будет определять линейную вариационную форму, которая для обратимых процессов должна совпадать с работой внутренних «силовых факторов»:

$$\delta L = \int_V (\tau\dot{R}\delta\dot{R} - k_V R_{,i}\delta R_{,i})d\overline{V} = \int_V (T\delta\dot{R} + q_i\delta R_{,i})d\overline{V}. \quad (13)$$

Покажем, что вариация функционала (13) позволяет для обратимых процессов определить температуру T и вектор теплового потока q_i через введенный потенциал. Действительно, по формулам Грина из (13) следуют определения соответствующих термодинамических «силовых» факторов:

$$T = \frac{\partial(K_V - U_V)}{\partial\dot{R}} = \tau\dot{R}, \quad q_i = \frac{\partial(K_V - U_V)}{\partial R_{,i}} = -k_V R_{,i}. \quad (14)$$

При обратимых процессах уравнение теплового баланса, полученное из (13) взятием по частям слагаемых с вариациями производных, будет гиперболического типа, а не параболического, и будет определять волновые свойства тепла:

$$\delta L = \int_V (-\tau\ddot{R} + k_V\Delta R)\delta R d\overline{V} + ... = 0.$$

Чтобы получить классическое уравнение теплового баланса, необходимо дополнить (13) следующим каналом диссипации, который назовем каналом диссипации Фурье:

$$\overline{\delta U_4} = \frac{1}{2}\int_0^t \int_V c_V(\dot{R}\delta R - R\delta\dot{R})dVdt. \qquad (15)$$

С учетом (13)–(15) предложенный обобщенный вариационный принцип имеет вид:

$$\delta L - \overline{\delta U_4} = \int_0^t \int_V (k_V\Delta R - \tau\ddot{R} - c_V\dot{R})\delta R dVdt + ... = 0. \quad (16)$$

Вариационное равенство (16) позволяет получить следующие определения температуры и теплового потока для модели с каналом диссипации (15), а также

записать линейные уравнения закона Гука для теплового потока и температуры:

$$\begin{cases} q_i = \dfrac{\partial (K_V - U_V)}{\partial R_{,i}} = -k_V R_{,i}, \\ T = \dfrac{\partial (K_V - U_V)}{\partial \dot{R}} + c_V R = \tau \dot{R} + c_V R. \end{cases} \tag{17}$$

Имея в виду второе уравнение (17), введем оператор температуры $T = t(R)$, $t(...) = c_V(...) + \tau(...)_{,t}$. Введение оператора представляется удобным для исключения потенциала R в физических соотношениях (17) и в разрешающих уравнениях. Действительно, действуя оператором температуры $t(...)$ на определяющее соотношение для теплового потока q_i в (17), получим закон теплопроводности Максвелла – Каттанео [14–17]:

$$c_V q_i + \tau \dot{q}_i = -k_V T_{,i}. \tag{18}$$

Из (18) следует, что при $\tau = 0$ закон теплопроводности вырождается в закон теплопроводности Фурье:

$$c_V q_i = -k_V T_{,i}. \tag{19}$$

Будем называть уравнения совместности (18), (19) законами теплопроводности.

Действуя оператором температуры на разрешающее уравнение (16), получим уравнение теплового баланса для модели теплопроводности Максвелла – Каттанео, записанное относительно температуры:

$$k_V \Delta T - \tau \ddot{T} - c_V \dot{T} = 0. \tag{20}$$

Будем называть уравнения баланса тепла (20) уравнением термодинамики в процессах теплообмена.

Отметим, что формально канал диссипации (15) должен соответствовать билинейному слагаемому $R\dot{R}$ в функционале (12). Поэтому в общем случае функционал обратимой части должен содержать в объёмной плотности квадратичную форму аргументов R и $\dot{R}$. Однако кинематическая переменная R относится к аргументам объёмной плотности потенциальной энергии, а кинематическая переменная $\dot{R}$ – к аргументам объёмной плотности кинетической энергии. Билинейное слагаемое этих аргументов формально нельзя отнести ни к плотности кинетической, ни к плотности потенциальной энергии:

$$K_V - U_V = -\frac{1}{2}(a_0 RR + 2a_1 R\dot{R} - \tau \dot{R}\dot{R}) - \frac{1}{2} k_V R_{,i} R_{,i}. \tag{21}$$

Билинейные слагаемые в плотности энергии и соответствующие каналы диссипации могут быть учтены или отброшены независимо друг от друга.

Модули обратимой части могут быть приняты равными нулю вне зависимости от наличия билинейного слагаемого, например, следует принять модуль $a_0 = 0$ для полного соответствия с классической моделью термодинамики (см. (20)).

Уравнения закона Гука (17), оператор температуры $t(...) = c_V(...) + \tau(...)_{,t}$, уравнение теплопроводности (19) и уравнение теплового баланса (20) сохраняют свой прежний вид.

4. Градиентная модель теплообмена (обратимый процесс)

Все каналы диссипации можно классифицировать по общему дифференциальному порядку аргументов канала диссипации. Действительно, для моделей термодинамики квадратичная форма плотности энергии может быть относительно первых производных по времени и координатам (классические модели), вторых производных по времени и координатам (градиентные модели) и так далее. Квадратичная форма, содержащая вторые производные, по определению принадлежит к градиентным теориям. Запишем общую структуру плотности энергии обратимой градиентной термодинамики:

$$\begin{gathered} L_V = K_V - U_V = \\ = \frac{1}{2}[-a_0 RR + (\tau - 2a_2)\dot{R}\dot{R} + a_6 \ddot{R}\ddot{R} - (a_8 - a_9)\Delta R \Delta R + \\ + 2a_1 R\dot{R} + 2a_2 R\ddot{R} + 2a_3 R\Delta R + 2a_4 \dot{R}\ddot{R} + 2a_5 \dot{R}\Delta R + 2a_{11}\ddot{R}\Delta R + \\ - (k_V + 2a_3) R_{,i} R_{,i} + 2a_{10} R_{,i}\dot{R}_{,i} + a_7 \dot{R}_{,i}\dot{R}_{,i} - a_9 R_{,ij} R_{,ij}]. \end{gathered} \tag{22}$$

Будем рассматривать далее случай $a_0 = 0$ и $A = 0$, A – работа «внешних сил». Приведем вариацию плотности энергии к виду возможной работы внутренних «силовых факторов»:

$$\delta(K_V - U_V) = T\delta\dot{R} + q_i \delta R_{,i}, \tag{23}$$

$$\begin{gathered} \delta L = \delta \int_{t_0}^{t_1} \int_V (K_V - U_V) dV dt = \\ = \int_{t_0}^{t_1} \int_V [(\tau \dot{R} - a_6 \dddot{R} - a_7 \Delta \dot{R})\delta \dot{R} + (-k_V R_{,i} + a_8 \Delta R_{,i})\delta R_{,i}] dV dt + ... \end{gathered} \tag{24}$$

Сравнивая соотношение (24) с выражением возможной работы «внутренних силовых факторов» (23), получим определение вектора теплового потока q_i для обратимых процессов в градиентной термодинамике и одновременно определяющее соотношение для теплового потока:

$$q_i = -k_V R_{,i} + a_8 \Delta R_{,i}. \tag{25}$$

Аналогичным образом даётся определение и получается уравнение закона Гука для температуры T:

$$T = \tau \dot{R} - a_6 \dddot{R} - a_7 \Delta \dot{R}. \tag{26}$$

После взятия по частям вариаций первых производных в (24) получим уравнение теплового баланса, записанное через термический потенциал:

$$\tau\ddot{R} - k_V \Delta R - a_6 \dddot{R} - a_7 \Delta\ddot{R} + a_8 \Delta\Delta R = 0. \qquad (27)$$

Дадим определение оператора температуры $T = t(R)$ в обратимой градиентной термодинамике, используя определяющее соотношение для температуры:

$$t(...) = \tau(...)_{,t} - a_6 (...)_{,ttt} - a_7 \Delta(...)_{,t}. \qquad (28)$$

Действуя на определяющее соотношение для теплового потока оператором температуры, получим закон теплопроводности для градиентной обратимой термодинамики:

$$\tau\dot{q}_i - a_6 \ddot{q}_i - a_7 \Delta\dot{q}_i = -k_V T_{,i} + a_8 \Delta T_{,i}. \qquad (29)$$

Наконец, действуя на уравнение теплового баланса (27) оператором температуры (28), получим уравнение теплового баланса, записанное в терминах температуры для градиентной обратимой термодинамики:

$$\tau\ddot{T} - k_V \Delta T - a_6 \dddot{T} - a_7 \Delta\ddot{T} + a_8 \Delta\Delta T = 0. \qquad (30)$$

Таким образом, полная вариационная постановка градиентной обратимой проблемы теплообмена относительно термического потенциала R (27) и относительно температуры (30) определяется в соответствии с принципом Лагранжа с динамическим лагранжианом (22). В результате мы установили, что вариационный метод позволяет построить модели теплообмена высокого порядка.

5. Градиентная модель теплообмена (диссипативный процесс)

Специфической чертой плотности энергии (22) является то, что сомножители слагаемых в квадратичной форме должны иметь дифференциальный порядок не выше двух. Действительно, в соответствии с (22) и (30) дифференциальный порядок уравнения баланса тепла должен быть четвертым. Как следствие, соответствующий спектр краевых задач должен сводиться к двум парам альтернативных граничных условий на поверхности тела и к двум парам альтернативных начальных (при $t = t_0$) и конечных (при $t = t_1$) условий. Поэтому в формулировку граничных условий могут входить только вариация термического потенциала δR и вариация его нормальной к поверхности производной $\delta(R_{,i} n_i)$. Аналогично в формулировку начальных и конечных условий могут входить только вариация термического потенциала δR и вариация первой производной по времени от термического потенциала $\delta\dot{R}$.

Особенностью плотности энергии (22) является также то, что если общий дифференциальный порядок каждого слагаемого четный, то он дает вклад только в слагаемые уравнения теплового баланса с четными производными. Отсюда следует, что каналы диссипации должны строиться по сомножителям тех билинейных слагаемых, общий дифференциальный порядок которых должен быть нечетным. Таких каналов для градиентной термодинамики всего три, один из которых – канал Фурье (15) – определяет диссипативные свойства классической термодинамики. Два других в совокупности с каналом Фурье определяют диссипативную градиентную термодинамику. Запишем сразу все каналы:

$$\begin{cases} \overline{\delta U_1} = \int\limits_V b_1(\dot{R}\delta R - R\delta\dot{R})d\bar{V} = -\int\limits_V 2b_1 R\delta\dot{R}d\bar{V} + ... \\ \overline{\delta U_2} = \int\limits_V b_2(\dot{R}\delta\ddot{R} - \ddot{R}\delta\dot{R})d\bar{V} = -\int\limits_V 2b_2 \ddot{R}\delta\dot{R}d\bar{V} + ... \\ \overline{\delta U_3} = \int\limits_V b_3(\dot{R}\delta\Delta R - \Delta R\delta\dot{R})d\bar{V} = \\ = -\int\limits_V (b_3 \Delta R\delta\dot{R} + b_3 \dot{R}_{,i}\delta R_{,i})d\bar{V} + ... \end{cases} \qquad (31)$$

Вариационный принцип, построенный с использованием (24) и (31), приводит к вариационному уравнению:

$$\begin{aligned} &\delta L - \overline{\delta U_1} - \overline{\delta U_2} - \overline{\delta U_3} = \\ &= \int\limits_{t_0}^{t_1} \int\limits_V \{(2b_1 R + \tau\dot{R} + 2b_2 \ddot{R} + b_3 \Delta R - a_6 \dddot{R} - a_7 \Delta\dot{R})\delta\dot{R} + \\ &+ (-k_V R_{,i} + b_3 \dot{R}_{,i} + a_8 \Delta R_{,i})\delta R_{,i}\} dVdt + ... = 0 \end{aligned} \qquad (32)$$

Сравнивая соотношение (32) с выражением возможной работы «внутренних силовых факторов», получим определение вектора теплового потока q_i для диссипативных процессов в градиентной термодинамике и одновременно уравнение закона Гука для теплового потока:

$$q_i = -k_V R_{,i} + b_3 \dot{R}_{,i} + a_8 \Delta R_{,i}. \qquad (33)$$

Аналогичным образом даётся определение и получается уравнение закона Гука для температуры T:

$$T = 2b_1 R + \tau\dot{R} + 2b_2 \ddot{R} + b_3 \Delta R - a_6 \dddot{R} - a_7 \Delta\dot{R}. \qquad (34)$$

После взятия по частям вариаций первых производных в (32) получим уравнение теплового баланса в терминах термического потенциала:

$$\begin{aligned} &\int\limits_{t_0}^{t_1} \int\limits_V (2b_1 \dot{R} + \tau\ddot{R} - k_V \Delta R + 2b_2 \dddot{R} + 2b_3 \Delta\dot{R} - \\ &- a_6 \ddddot{R} - a_7 \Delta\ddot{R} + a_8 \Delta\Delta R)\delta R dVdt + ... = 0. \end{aligned} \qquad (35)$$

Дадим определение оператора температуры $T = t(R)$ в необратимой градиентной термодинамике, используя уравнение закона Гука для температуры:

$$\begin{aligned} t(...) &= 2b_1 (...) + \tau(...)_{,t} + 2b_2 (...)_{,tt} + \\ &+ b_3 \Delta(...) - a_6 (...)_{,ttt} - a_7 \Delta(...)_{,t}. \end{aligned} \qquad (36)$$

По сравнению с (28), оператор температуры в градиентной необратимой термодинамике содержит три дополнительных слагаемых, содержащих модули диссипативных свойств $b_1; b_2; b_3$.

Действуя на определяющее соотношение для теплового потока (33) оператором температуры (36), получим закон теплопроводности для градиентной диссипативной термодинамики:

$$2b_1 q_i + \tau \dot{q}_i + 2b_2 \ddot{q}_i + b_3 \Delta q_i - a_6 \dddot{q}_i - a_7 \Delta \dot{q}_i = \\ = -k_V T_{,i} + b_3 \dot{T}_{,i} + a_8 \Delta T_{,i}. \quad (37)$$

Закон теплопроводности (37) является обобщением законов теплопроводности Джеффри и Гаера – Крумхансля [18–20].

Действуя на уравнение теплового баланса (35) оператором температуры (36), получим уравнение теплового баланса для обобщенной градиентной диссипативной термодинамики:

$$2b_1 \dot{T} + \tau \ddot{T} + 2b_2 \dddot{T} - a_6 \ddddot{T} - k_V \Delta T + \\ + 2b_3 \Delta \dot{T} - a_7 \Delta \ddot{T} + a_8 \Delta \Delta T = 0. \quad (38)$$

Полная вариационная постановка градиентной необратимой термодинамики относительно термического потенциала R (35) и относительно температуры T (38) строится на основании предложенного обобщения вариационного принципа Л.И. Седова (7).

Заключение

Предложено развитие вариационного принципа, основанного на концепции каналов диссипации для моделирования диссипативных процессов. Предложенный вариационный принцип (теорема 1) дает возможность по известной модели обратимого процесса (известному лагранжиану) строить диссипативные модели, добавляя необходимое количество каналов диссипации, аргументами которых являются сомножители билинейных слагаемых лагранжиана. Наиболее плодотворным оказалось вариационное моделирование законов теплопроводности и соответствующих им уравнений баланса тепла. При этом все уравнения законов теплопроводности получены как уравнения совместности при исключении термического потенциала из уравнений закона Гука для температуры и теплового потока. Таким универсальным способом были получены законы теплопроводности Фурье, Максвелла – Каттанео, Гаера – Крумхаксля, Джеффри и ряд более сложных законов теплопроводности. Отдельно следует отметить, что уравнения теплопроводности требуют ревизии в части множителя при тепловом потоке: чтобы получались правильные уравнения теплового баланса, необходимо в уравнениях соответствующего закона теплопроводности множитель при тепловом потоке заменить с единицы на удельную теплоёмкость при постоянном объёме.

Библиографический список

1. Седов Л.И. Об основных принципах механики сплошной среды. – М.: Изд-во МГУ, 1961. – 26 с.
2. Седов Л.И. Об основных концепциях механики сплошной среды // Некоторые проблемы математики и механики. – 1961. – С. 227–235.
3. Седов Л.И., Эглит М.Э. Построение неголономных моделей сплошных сред с учетом конечности деформаций и некоторых физико-химических эффектов // Докл. АН СССР. – 1962. – Т. 142, № 1. – С. 54–59.
4. Бердичевский В.Л. Построение моделей сплошных сред при помощи вариационного принципа // ПММ. – 1966. – Т. 30. – Вып. 3. – С. 510–530.
5. Бердичевский В.Л. Вариационные методы построения моделей сплошных сред с необратимыми процессами в специальной теории относительности // ПММ. – 1966. – Т. 30. – Вып. 6. – С. 1081–1086.
6. Лурье С.А., Белов П.А. Вариационная модель неголономных сред // Механика композиционных материалов и конструкций. – 2001. – Т. 7, № 2. – С. 436–444.
7. Белов П.А., Горшков А.Г., Лурье С.А. Вариационная модель неголономных 4D-сред // Механика твердого тела. – 2006. – № 6. – С. 41–58.
8. Lurie S.A., Belov P.A., Volkov-Bogorodskii D.B. Variational models of coupled gradient thermoelasticity and thermal conductivity // Mater. Phys. Mech. – 2019. – № 42. – P. 564–581.
9. 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 Higher Gradient Materials and Related Generalized Continua / Eds.: Altenbach, H., Muller, W.H., Abali, B.E. – Springer: Cham, Switzerland. – 2019. – Vol. 11. – P. 135–154.
10. Lurie S.A., Belov P.A. On the nature of the relaxation time, the Maxwell-Cattaneo and Fourier law in the thermodynamics of a continuous medium, and the scale effects in thermal conductivity // Continuum. Mech. Thermodyn. – 2020. – № 32. – P. 709–728.
11. Sellitto A., Cimmelli V.A., Jou D. Mesoscopic Theories of Heat Transport in Nanosystems. – S.: Springer International Publishing Switzerland – 2016. – 170 p.
12. Zhukovsky K.V., Srivastava H.M. Analytical solutions for heat diffusion beyond Fourier law // Appl. Math. Comput. – 2017. – Vol. 293. – P. 423–437.
13. Sobolev S.L. Nonlocal two-temperature model: application to heat transport in metals irradiated by ultrashort laser pulses // Int. J. Heat Mass Tran. – 2016. – Vol. 94. – P. 138–144.
14. Maxwell J.C. On the Dynamical Theory of Gases // Philosophical Transactions of the Royal Society of London. – 1867. – Vol. 157. – P. 49–88.
15. Cattaneo C. Sulla Condizione Del Calore // Atti Del Semin. Matem. E Fis. Della Univ. Modena. – 1948. – Vol. 3. – P. 83–101.
16. Vernotte M.P. La véritableéquation de chaleur // Comptes rendus hebdomadaires des séances de l'Académie des sciences. – 1958. – Vol. 247. – P. 2103–2105.
17. Vernotte M.P. Les paradoxes de la théorie continue de léquation de la chaleur // C.R. Hebd. Seances Acad. Sci. – 1958. – Vol. 246, no. 22. – P. 3154–3155.
18. Joseph D.D. Preziosi L. Heat waves. Reviews of modern physics // Rev. Mod. Phys. – 1989. – Vol. 61. – P. 41–73.

19. Sobolev S.L. Hyperbolic heat conduction, effective temperature, and third law for nonequilibrium systems with heat flux // Physical review. – 2018. – Vol. E 97. – P. 022122.

20. Kovács R., Fehér A., Sobolev S. On the two-temperature description of heterogeneous materials // International Journal of Heat and Mass Transfer. – 2022. – Vol. 194. – P. 123021.

References

1. Sedov L.I. Ob osnovnykh printsipakh mekhaniki sploshnoi sredy [On the basic principles of continuum mechanics]. Moscow, Publishing House of Moscow State University, 1961, 26 p.

2. Sedov L.I. Ob osnovnykh kontseptsiiakh mekhaniki sploshnoi sredy [On the basic concepts of continuum mechanics]. *Some problems of mathematics and mechanics*. 1961, pp. 227-235.

3. Sedov L.I., Eglit M.E. Postroenie negolonomnykh modelei sploshnykh sred s uchetom konechnosti deformatsii i nekotorykh fiziko-khimicheskikh effektov [Construction of Nonholonomic Models of Continuous Media Taking into Account the Finiteness of Deformations and Certain Physicochemical Effects]. R*eport USSR Academy of Sciences*, 1962, vol. 142, no. 1, pp. 54-59.

4. Berdichevskii V.L. Postroenie modelei sploshnykh sred pri pomoshchi variatsionnogo printsipa [Building models of continuous media using the variational principle]. *Applied Mathematics and mechanics*. 1966, vol. 30, no. 3, pp. 510-530.

5. Berdichevskii V.L. Variatsionnye metody postroeniia modelei sploshnykh sred s neobratimymi protsessami v spetsial'noi teorii otnositel'nosti [Variational methods for constructing models of continuous media with irreversible processes in the special theory of relativity] . *Applied Mathematics and mechanics*. 1966, vol. 30, no. 6, pp. 1081-1086.

6. Lur'e S.A., Belov P.A. Variatsionnaia model' negolonomnykh sred [Variational model of nonholonomic media]. *Mechanics of composite materials and structures*, 2001, vol. 7, no 2, pp. 436-444.

7. Belov P.A., Gorshkov A.G., Lur'e S.A. Variatsionnaia model' negolonomnykh 4D-sred [Вариационная модель неголономных 4D-сред]. Solid Mechanics. 2006, no. 6., pp. 41-58.

8. Lurie S.A., Belov P.A., Volkov-Bogorodskii D.B. Variational models of coupled gradient thermoelasticity and thermal conductivity. *Mater. Phys. Mech*. 2019, no. 42, pp. 564–581.

9. 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 Higher Gradient Materials and Related Generalized Continua. Altenbach, H., Muller, W.H., Abali, B.E., Eds.; Springer: Cham, Switzerland*. 2019, vol. 11, pp. 135–154.

10. Lurie S.A., Belov P.A. On the nature of the relaxation time, the Maxwell-Cattaneo and Fourier law in the thermodynamics of a continuous medium, and the scale effects in thermal conductivity. *Continuum. Mech. Thermodyn*. 2020, no. 32, pp. 709–728.

11. Sellitto A., Cimmelli V.A., Jou D. Mesoscopic Theories of Heat Transport in Nanosystems. – S.: Springer International Publishing Switzerland. 2016, 170 p.

12. Zhukovsky K.V., Srivastava H.M. Analytical solutions for heat diffusion beyond Fourier law. *Appl. Math. Comput*. 2017, vol. 293, pp. 423-437.

13. Sobolev S.L. Nonlocal two-temperature model: application to heat transport in metals irradiated by ultrashort laser pulses. *Int. J. Heat Mass Tran*. 2016, vol. 94, pp. 138-144.

14. Maxwell J.C. On the Dynamical Theory of Gases. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*. 1867, vol. 157, pp. 49-88.

15. Cattaneo C. Sulla Condizione Del Calore. *Atti Del Semin. Matem. E Fis. Della Univ. Modena*. 1948, vol. 3, pp. 83-101.

16. Vernotte M. P. La véritableéquation de chaleur. *Comptes rendus hebdomadaires des séances de l'Académie des sciences*. 1958, vol. 247, pp. 2103–2105.

17. Vernotte M.P. Les paradoxes de la théorie continue de léquation de la chaleur. *C. R. Hebd. Seances Acad. Sci*. 1958, vol. 246, no. 22, pp. 3154–3155.

18. Joseph D.D. Preziosi L., Heat Waves. Reviews of Modern Physics. *Rev. Mod. Phys*. 1989, vol. 61, pp. 41-73.

19. Sobolev S.L. Hyperbolic heat conduction, effective temperature, and third law for nonequilibrium systems with heat flux. *Physical review*. 2018, vol. E 97, pp. 022122.

20. Kovács R., Fehér A., Sobolev S. On the two-temperature description of heterogeneous materials. *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 2022, vol. 194, pp. 123021.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 23-11-00275), выданного Институту прикладной механики РАН.

Конфликт интересов. Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Вклад авторов равноценен.

Funding. The work was carried out with financial support from the Russian Science Foundation (grant No. 23-11-00275), issued to the Institute of Applied Mechanics of the Russian Academy of Sciences.

Conflict of interest. The authors declare no conflict of interest.

The contribution of the authors is equivalent.