Cvičení 5 – Zákony zachování a konstitutivní vztahy

Příklad 1. Odvoďte rovnici kontinuity pro nestlačitelnou kapalinu

$$\left.\begin{aligned} &\frac{D\rho}{Dt} + \rho \operatorname{div} \vec{v} = 0 \\ &\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \vec{v}) = 0 \end{aligned}\right\} \quad \text{obecné tvary rovnice kontinuity}$$

Často opakované chybné odpovědi: $\rho = \text{const}\,, \quad \dfrac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \ldots$

Správná odpověď: $\dfrac{D\rho}{Dt} = 0 \quad \Rightarrow \quad \boxed{\operatorname{div} \vec{v} = 0}$

Příklad 2. Vyjádřete zákon zachování hmoty v posunutí případě malých deformací

$\rho_0 = J\rho \quad \leftarrow$ obecný zákon zachování hmoty vyjádřený pomocí deformačního gradientu

V případě malých deformací $J \approx 1 + \operatorname{tr} \mathbf{H} = 1 + \operatorname{div} \vec{U} \approx 1 + \operatorname{div} \vec{u}$

A tedy $\rho \approx \dfrac{\rho_0}{1 + \operatorname{div} \vec{u}} \quad \Rightarrow \quad \boxed{\rho = \rho_0 (1 - \operatorname{div} \vec{u})}$

V případě nestlačitelného prostředí $\operatorname{div} \vec{u} = 0\,.$

Příklad 3. Rovnice přenosu tepla pro nestlačitelnou kapalinu

$$\boxed{\rho\dot{\epsilon} = \mathbf{t} : \mathbf{d} - \operatorname{div}\vec{q} + \rho h} \longleftarrow$$

Zákon zachování energie (viz Zákony zachování str. 7) vyjádříme ve stavových proměnných teplota - tlak.

Levá strana rovnice:

$$d\epsilon = Td\eta - pdv \quad (dU = TdS - pdV) \longleftarrow$$ 1. termodynamická věta

$$dv = 0 \longleftarrow$$ nestlačitelná kapalina

$$\rho\dot{\epsilon} = \rho T\dot{\eta}\,, \quad \text{kde} \quad \eta = \eta(p,T) \longleftarrow$$ chceme vyjádřit zákon zachování energie v proměnných tlak a teplota

$$\rho\dot{\epsilon} = \rho T\dot{\eta} = \rho \underbrace{T\left(\frac{\partial\eta}{\partial T}\right)_p}_{\text{měrné teplo při konstantním tlaku}} \dot{T} + T\rho \underbrace{\left(\frac{\partial\eta}{\partial p}\right)_T}_{\text{teplotní roztažnost}} \dot{p} = \rho c_p \dot{T} - \alpha T\dot{p} \longleftarrow$$ "pojmenujeme derivace"

$$\rho\dot{\epsilon} = \rho c_p\dot{T} - \alpha T\dot{p} = \underbrace{\rho c_p\frac{\partial T}{\partial t} + \rho c_p\,\vec{v}\cdot\operatorname{grad}T - \alpha T\left(\frac{\partial p}{\partial t} + \vec{v}\cdot\operatorname{grad}p\right)}_{\text{rozepíšeme materiálové derivace}}$$

Pravá strana rovnice, 1. člen:

$$\mathbf{t}:\mathbf{d} = \left(\tfrac{1}{3}(\operatorname{tr}\mathbf{t})\mathbf{I} + \underbrace{\mathbf{t}^{\mathrm{D}}}_{\text{deviátor napětí (symetrický tenzor)}}\right) : \tfrac{1}{2}\left(\operatorname{grad}\vec{v} + (\operatorname{grad}\vec{v})^T\right) = \mathbf{t}^{\mathrm{D}} : \operatorname{grad}\vec{v}$$

$$\mathbf{I} : \operatorname{grad}\vec{v} = \delta_{ij}\frac{\partial v_i}{\partial x_j} = \frac{\partial v_i}{\partial x_i} = \operatorname{div}\vec{v} = 0$$

$$\mathbf{t}^{\mathrm{D}} : \operatorname{grad}\vec{v} = t^{\mathrm{D}}_{ij}\frac{\partial v_i}{\partial x_j} = t^{\mathrm{D}}_{ji}\frac{\partial v_i}{\partial x_j} = \mathbf{t}^{\mathrm{D}} : (\operatorname{grad}\vec{v})^T$$

$$\boxed{\rho\dot{\epsilon} = \mathbf{t} : \mathbf{d} - \operatorname{div}\vec{q} + \rho h}$$

$$\rho\dot{\epsilon} = \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho c_p\, \vec{v}\cdot \operatorname{grad} T - \alpha T \left(\frac{\partial p}{\partial t} + \vec{v}\cdot \operatorname{grad} p \right) \longleftarrow \text{levá strana}$$

$$\mathbf{t} : \mathbf{d} = \mathbf{t}^{\mathrm{D}} : \operatorname{grad}\vec{v} \longleftarrow \text{pravá strana, 1. člen}$$

Pravá strana rovnice, 2. člen:

$$\vec{q} = -k \operatorname{grad} T \longleftarrow \text{Fourierův zákon, } k \text{ je teplotní vodivost}$$

$$-\operatorname{div}\vec{q} = \operatorname{div}\left(k \operatorname{grad} T\right)$$

Dáme vše dohromady a přeorganizujeme tak, aby na levé straně byla parciální derivace teploty podle času:

$$\boxed{\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \underbrace{-\rho c_p \vec{v}\cdot \operatorname{grad} T}_{\text{advekce tepla „konvekce“}} + \underbrace{\operatorname{div}\left(k \operatorname{grad} T\right)}_{\text{vedení tepla „kondukce“}} + \underbrace{\alpha T \left(\frac{\partial p}{\partial t} + \vec{v}\cdot \operatorname{grad} p \right)}_{\text{adiabatické zahřívání}} + \underbrace{\mathbf{t}^{\mathrm{D}} : \operatorname{grad}\vec{v}}_{\text{disipativní zahřívání}} + \underbrace{\rho h}_{\text{zdroje}}}$$

Pokud jsou zdroje nulové a zanedbáme adiabatické a disipativní zahřívání:

$$\boxed{\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = -\rho c_p \vec{v}\cdot \operatorname{grad} T + \operatorname{div}\left(k \operatorname{grad} T\right)}$$

Příklad 4: Aplikace Clausius-Duhemovy nerovnosti na viskózní tepelně vodivou kapalinu

Zákony zachování str. 8:

$$\boxed{\begin{aligned} &\rho\dot{\eta} + \mathrm{div}\left(\frac{\vec{q}}{T}\right) - \frac{\rho h}{T} \geq 0 \\ &\rho(T\dot{\eta} - \dot{\epsilon}) + \mathbf{t} : \mathbf{d} - \frac{\vec{q}\cdot\mathrm{grad}\,T}{T} \geq 0 \end{aligned}}$$

použijeme tento tvar

$$\mathbf{t} = \hat{\mathbf{t}}(\mathbf{d}, T, \mathrm{grad}T, \rho), \quad \vec{q} = \hat{\vec{q}}(\mathbf{d}, T, \mathrm{grad}T, \rho), \quad \epsilon = \hat{\epsilon}(\mathbf{d}, T, \mathrm{grad}T, \rho)$$

dokážeme později

Princip omniprezence: $\eta = \hat{\eta}(\mathbf{d}, T, \mathrm{grad}T, \rho)$

$$\rho(T\dot{\eta} - \dot{\epsilon}) + \mathbf{t} : \mathbf{d} - \frac{\vec{q}\cdot\mathrm{grad}\,T}{T} =$$

$$= \rho\left[\left(T\frac{\partial\hat{\eta}}{\partial\rho} - \frac{\partial\hat{\epsilon}}{\partial\rho}\right)\dot{\rho} + \left(T\frac{\partial\hat{\eta}}{\partial T} - \frac{\partial\hat{\epsilon}}{\partial T}\right)\dot{T} + \left(T\frac{\partial\hat{\eta}}{\partial\mathbf{d}} - \frac{\partial\hat{\epsilon}}{\partial\mathbf{d}}\right) : \dot{\mathbf{d}} + \left(T\frac{\partial\hat{\eta}}{\partial\,\mathrm{grad}\,T} - \frac{\partial\hat{\epsilon}}{\partial\,\mathrm{grad}\,T}\right)\cdot \dot{\overline{\mathrm{grad}\,T}}\right] +$$

$$+ \mathbf{t} : \mathbf{d} - \frac{\vec{q}\cdot\mathrm{grad}\,T}{T} \geq 0$$

Aplikujme nyní rovnici kontinuity: $\dot{\rho} + \rho\,\mathrm{div}\,\vec{v} = 0 \quad \rightarrow \quad \dot{\rho} = -\rho\,\mathrm{div}\,\vec{v} = -\rho\,\mathrm{tr}\,\mathbf{d} = -\rho\mathbf{I} : \mathbf{d}$

$$\rho\left[\left(T\frac{\partial\hat{\eta}}{\partial T}-\frac{\partial\hat{\epsilon}}{\partial T}\right)\dot{T}+\left(T\frac{\partial\hat{\eta}}{\partial\mathbf{d}}-\frac{\partial\hat{\epsilon}}{\partial\mathbf{d}}\right):\dot{\mathbf{d}}+\left(T\frac{\partial\hat{\eta}}{\partial\mathrm{grad}\,T}-\frac{\partial\hat{\epsilon}}{\partial\mathrm{grad}\,T}\right)\cdot\mathrm{gra\dot{d}}\,T\right]+$$
$$+\left[\mathbf{t}-\rho^2\left(T\frac{\partial\hat{\eta}}{\partial\rho}-\frac{\partial\hat{\epsilon}}{\partial\rho}\right)\mathbf{I}\right]:\mathbf{d}-\frac{\vec{q}\cdot\mathrm{grad}\,T}{T}\geq 0$$

Časové derivace $\dot{T},\ \dot{\mathbf{d}},\ \mathrm{gra\dot{d}}\,T$ mohou nabývat libovolných hodnot. Abychom zajistili platnost nerovnosti , musí platit, že výrazy, které u nich stojí, jsou nulové:

$$\frac{\partial\hat{\eta}}{\partial T}=\frac{1}{T}\frac{\partial\hat{\epsilon}}{\partial T},\qquad \frac{\partial\hat{\eta}}{\partial\mathbf{d}}=\frac{1}{T}\frac{\partial\hat{\epsilon}}{\partial\mathbf{d}},\qquad T\frac{\partial\hat{\eta}}{\partial\mathrm{grad}\,T}=\frac{\partial\hat{\epsilon}}{\partial\mathrm{grad}\,T}$$

rovnice (1a,b,c)

Clausius-Duhemova nerovnost se tak redukuje na tzv. *residuální nerovnost*:

$$\Gamma(\mathbf{d},T,\mathrm{grad}T,\rho)\geq 0\,,\quad \text{kde}\quad \Gamma=\left[\mathbf{t}-\rho^2\left(T\frac{\partial\hat{\eta}}{\partial\rho}-\frac{\partial\hat{\epsilon}}{\partial\rho}\right)\mathbf{I}\right]:\mathbf{d}-\frac{\vec{q}\cdot\mathrm{grad}\,T}{T}\,.$$

Zderivujme (1a) podle $\mathbf{d}$ a (1b) podle T:

$$\frac{\partial^2\hat{\eta}}{\partial\mathbf{d}\partial T}=\frac{1}{T}\frac{\partial^2\hat{\epsilon}}{\partial\mathbf{d}\partial T},\qquad \frac{\partial^2\hat{\eta}}{\partial T\partial\mathbf{d}}=\frac{1}{T}\frac{\partial^2\hat{\epsilon}}{\partial T\partial\mathbf{d}}-\frac{1}{T^2}\frac{\partial\hat{\epsilon}}{\partial\mathbf{d}}\qquad\rightarrow\qquad \frac{1}{T}\frac{\partial^2\hat{\epsilon}}{\partial\mathbf{d}\partial T}=\frac{1}{T}\frac{\partial^2\hat{\epsilon}}{\partial T\partial\mathbf{d}}-\frac{1}{T^2}\frac{\partial\hat{\epsilon}}{\partial\mathbf{d}}$$

Odtud $\dfrac{\partial\hat{\epsilon}}{\partial\mathbf{d}}=0$ a s ohledem na (1b) také $\dfrac{\partial\hat{\eta}}{\partial\mathbf{d}}=0\,.$

Analogicky lze ukázat, že platí také $$\frac{\partial\hat{\eta}}{\partial \mathrm{grad}\, T} = 0\,, \qquad \frac{\partial\hat{\epsilon}}{\partial \mathrm{grad}\, T} = 0\,.$$

Důležitý výsledek:

$$\eta = \hat{\eta}(\mathbf{d}, T, \mathrm{grad} T, \rho) \;\longrightarrow\; \boxed{\eta = \hat{\eta}(T,\rho)}$$

$$\epsilon = \hat{\epsilon}(\mathbf{d}, T, \mathrm{grad} T, \rho) \;\longrightarrow\; \boxed{\epsilon = \hat{\epsilon}(T,\rho)}$$

$$\frac{\partial\hat{\eta}}{\partial T} = \frac{1}{T}\frac{\partial\hat{\epsilon}}{\partial T}$$ (rovnice 1a)

Termodynamická rovnováha: $\vec{v}(\vec{x},t) = \mathrm{const}\,, \quad T(\vec{x},t) = \mathrm{const}$

$$\Rightarrow \quad \mathbf{d} = \mathbf{0}\,, \quad \mathrm{grad}\, T = 0$$

$$\Rightarrow \quad \Gamma(\mathbf{d}, T, \mathrm{grad} T, \rho) = \left[\mathbf{t} - \rho^2\left(T\frac{\partial\hat{\eta}}{\partial\rho} - \frac{\partial\hat{\epsilon}}{\partial\rho}\right)\mathbf{I}\right] : \mathbf{d} - \frac{\vec{q}\cdot\mathrm{grad}\, T}{T} = 0$$

V rovnovážném stavu nabývá tedy Γ minima:

$$\left(\frac{\partial\Gamma}{\partial\mathbf{d}}\right)_{\mathrm{E}} = \mathbf{0}\,, \qquad \left(\frac{\partial\Gamma}{\partial\,\mathrm{grad}\, T}\right)_{\mathrm{E}} = \vec{0}$$

Zderivováním výrazu pro Γ dostaneme:

$$\left(\frac{\partial\Gamma}{\partial\mathbf{d}}\right)_{\mathrm{E}} = \mathbf{t}_{\mathrm{E}} - \rho^2\left(T\frac{\partial\hat{\eta}}{\partial\rho} - \frac{\partial\hat{\epsilon}}{\partial\rho}\right)_{\mathrm{E}}\mathbf{I} = \mathbf{0}\,, \qquad \left(\frac{\partial\Gamma}{\partial\,\mathrm{grad}\, T}\right)_{\mathrm{E}} = -\frac{\vec{q}_{\mathrm{E}}}{T} = \vec{0}$$

$$\left(\frac{\partial \Gamma}{\partial \mathbf{d}}\right)_{\rm E} = \mathbf{t}_{\rm E} - \rho^2 \left(T\frac{\partial \hat{\eta}}{\partial \rho} - \frac{\partial \hat{\epsilon}}{\partial \rho}\right)_{\rm E} \mathbf{I} = \mathbf{0}\,, \qquad \left(\frac{\partial \Gamma}{\partial\, \mathrm{grad}\, T}\right)_{\rm E} = -\frac{\vec{q}_{\rm E}}{T} = \vec{0}$$

$$\mathbf{t}_{\rm E} = -p_{\rm E}\mathbf{I}\,, \quad \vec{q}_{\rm E} = \vec{0}$$

$$\boxed{p = -\rho^2 \left(T\frac{\partial \hat{\eta}}{\partial \rho} - \frac{\partial \hat{\epsilon}}{\partial \rho}\right)}$$

termodynamický tlak.

$$p = -\rho^2 \left(T\frac{\partial \hat{\eta}}{\partial \rho} - \frac{\partial \hat{\epsilon}}{\partial \rho}\right) \quad \rightarrow \quad \frac{\partial \hat{\eta}}{\partial \rho} = \frac{1}{T}\left(\frac{\partial \hat{\epsilon}}{\partial \rho} - \frac{p}{\rho^2}\right)$$

rovnice (2)

rovnice (1a)

$$\frac{\partial \hat{\eta}}{\partial T} = \frac{1}{T}\frac{\partial \hat{\epsilon}}{\partial T}$$

Napišme si nyní totální diferenciál pro hustotu entropie a použijme rovnici (1a) a (2):

$$\mathrm{d}\eta = \frac{\partial \hat{\eta}}{\partial \rho}\mathrm{d}\rho + \frac{\partial \hat{\eta}}{\partial T}\mathrm{d}T = \frac{1}{T}\left(\frac{\partial \hat{\epsilon}}{\partial \rho} - \frac{p}{\rho^2}\right)\mathrm{d}\rho + \frac{1}{T}\frac{\partial \hat{\epsilon}}{\partial T}\mathrm{d}T$$

Gibbsův vztah pro klasickou viskózní tepelně vodivou kapalinu (rovnice 3)

Použitím totálního diferenciálu pro hustotu vnitřní energie,

$$\mathrm{d}\epsilon = \frac{\partial \hat{\epsilon}}{\partial \rho}\mathrm{d}\rho + \frac{\partial \hat{\epsilon}}{\partial T}\mathrm{d}T$$

lze Gibbsův vztah upravit do tvaru $\mathrm{d}\eta = \frac{1}{T}\mathrm{d}\epsilon - \frac{p}{T}\frac{\mathrm{d}\rho}{\rho^2}\,.$

Zaveďme specifický objem $v := 1/\rho$ a $\mathrm{d}v = -\mathrm{d}\rho/\rho^2\,.$ Potom $\mathrm{d}\eta = \frac{1}{T}\mathrm{d}\epsilon + \frac{p}{T}\mathrm{d}v\,.$

Podmínku nutnou a postačující k tomu, aby $\mathrm{d}\eta$ v rovnici (3) byl totální diferenciál, lze vyjádřit následovně:

$$\frac{\partial}{\partial T}\left[\frac{1}{T}\left(\frac{\partial\hat{\epsilon}}{\partial\rho}-\frac{p}{\rho^2}\right)\right]=\frac{\partial}{\partial\rho}\left[\frac{1}{T}\frac{\partial\hat{\epsilon}}{\partial T}\right] \Rightarrow \frac{1}{T}\frac{\partial^2\hat{\epsilon}}{\partial\rho\,\partial T}=\frac{1}{T}\left(\frac{\partial^2\hat{\epsilon}}{\partial T\partial\rho}-\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial p}{\partial T}\right)-\frac{1}{T^2}\left(\frac{\partial\hat{\epsilon}}{\partial\rho}-\frac{p}{\rho^2}\right)$$

Odtud:

$$\frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{p(\rho,T)}{T}\right)=-\left(\frac{\rho}{T}\right)^2\frac{\partial\hat{\epsilon}(\rho,T)}{\partial\rho}$$

$p(\rho,T)$ ... *termální stavová rovnice*

$\hat{\epsilon}(\rho,T)$ ... *kalorická stavová rovnice*

Důležité z hlediska měření:
Termální stavové rovnice se experimentálně určují lépe než kalorické stavové rovnice.

Shrnutí:

Vztahy mezi $\hat{\epsilon},\ \hat{\eta},\ p$ jsou následující:

$$\frac{\partial\hat{\eta}}{\partial T}=\frac{1}{T}\frac{\partial\hat{\epsilon}}{\partial T},\quad \frac{\partial\hat{\eta}}{\partial\rho}=\frac{1}{T}\left(\frac{\partial\hat{\epsilon}}{\partial\rho}-\frac{p}{\rho^2}\right),\quad \frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{p(\rho,T)}{T}\right)=-\left(\frac{\rho}{T}\right)^2\frac{\partial\hat{\epsilon}(\rho,T)}{\partial\rho}$$

$$\left.\begin{aligned}&\mathbf{t}=(-p+\nu_0)\mathbf{I}+2\mu_v\mathbf{d}+a_2\mathbf{d}^2+\dots\\&\vec{q}=-k\,\mathrm{grad}\,T+c_1\mathbf{d}\cdot\mathrm{grad}\,T+c_2\mathbf{d}^2\cdot\mathrm{grad}T\end{aligned}\right\}\ \text{odvodíme později}$$

kde

$p=p(\rho,T)$

$\nu_0,\mu_v,a_i,c_i,\kappa$ jsou funkce $\rho,T,I_d,II_d,III_d,\dots$

$\nu_{0\mathrm{E}}=0$