

УДК 539.3

ДО ВИЗНАЧЕННЯ ХІМІЧНОГО ПОТЕНЦІАЛУ
У ДВОВИМІРНИХ ЗАДАЧАХ МОДЕЛІ ЛОКАЛЬНО
ГРАДІЄНТНОГО ТЕРМОПРУЖНОГО ТІЛА

Тарас НАГІРНИЙ¹, Костянтин ЧЕРВІНКА²

¹ Центр математичного моделювання,
вул. Дудаєва, 15 79005 Львів, Україна

² Львівський національний університет імені Івана Франка,
вул. Університетська, 1 79000 Львів, Україна

Побудовано методику дослідження двовимірних полів хімічного потенціалу та температури у рамках моделі локально градієнтного термопружного тіла. Розглянуто стаціонарний стан безмежної площини з еліптичним отвором, на межі якого задано постійні за координатою значення збурень хімічного потенціалу та температури. У безмежно віддаленій точці приймають природні умови обмеженості розв'язуючих функцій. Для знаходження розв'язку системи рівнянь застосовано метод розділення змінних до рівняння, записаного у пових змінних, які пов'язані з конформним відображенням області, зайнятої тілом на одиничний круг. Показано, що у випадку кола отриманий розв'язок збігається з розв'язком відповідної одновимірної задачі.

Ключові слова: локально градієнтні термопружні тіла, хімічний потенціал.

Коректне врахування приповерхневої неоднорідності в термомеханіці дає змогу описувати різні розмірні ефекти, у тім числі межі міцності, а також вплив на них температури і навколошнього середовища. Одним з ефективних підходів до опису такої неоднорідності є локально градієнтний підхід. Математичні моделі, побудовані в рамках цього підходу, називають локально градієнтними. В них одним з модельних параметрів є збурення η хімічного потенціалу H стосовно початкового значення H_* , яке можна ототожнити зі збуренням енергії взаємодії. За відліковий стан тіла звичайно приймають стан однорідного, вільного від силового навантаження безмежного середовища при "кімнатній" температурі T_* . Знехтувавши впливом механічних полів на хімічний потенціал та температуру, методика розв'язування краївих задач локально градієнтої термомеханіки зводиться до визначення хімічного потенціалу та температури, вивчення на цій підставі напруженого деформованого стану. В рамках локально градієнтного підходу на основі розв'язку модельних одновимірних задач проведено широкий комплекс досліджень полів різної фізичної природи [1 – 5]. Наукове і практичне зацікавлення становить вивчення приповерхневої неоднорідності у двовимірному формулуванні.

Мета праці – побудова методики дослідження за локально градієнтного підходу стаціонарних двовимірних полів хімічного потенціалу та температури для середовища з еліптичною порожниною. Вона може бути застосована до тіл іншої геометричної конфігурації, які допускають конформне відображення на одиничний круг.

Розглянемо термопружне тверде тіло, що займає область $V = \{(x, y) | x^2/a^2 + y^2/b^2 > 1\}$ евклідового простору у декартової системі координат $\{x, y, z\}$. Важатимемо, що на межі ∂V ($x^2/a^2 + y^2/b^2 = 1$) тіла задано постійні в часі та за координатою значення збурень температури θ_a та хімічного потенціалу η_a .

Систему рівнянь, що описує стаціонарний розподіл хімічного потенціалу η та температури θ відповідно до локально градієнтного підходу, можна записати у вигляді [1], [3]

$$\begin{aligned} \nabla^2 \eta - \kappa^2 \eta - \kappa_t^2 \theta &= 0, \\ \nabla^2 \theta &= 0, \end{aligned} \quad (1)$$

де κ, κ_t – сталі.

Для формульовання крайової задачі цю систему рівнянь треба доповнити граничними умовами та умовами на безмежності. Приймемо їх такими:

$$\begin{aligned} \eta|_{\partial V} &= \eta_a, & \theta|_{\partial V} &= \theta_a, \\ \lim_{x^2+y^2 \rightarrow \infty} |\eta| &< \infty, & \lim_{x^2+y^2 \rightarrow \infty} |\theta| &< \infty. \end{aligned} \quad (2)$$

Розв'язком другого рівняння системи (1), що задовільняє умови (2), є

$$\theta = \theta_a. \quad (3)$$

Для знаходження розв'язку першого рівняння (1) введемо у розгляд функцію η_0

$$\eta_0 = \eta + \frac{\kappa_t^2}{\kappa^2} \theta_a.$$

Тоді на основі (1), (2) для її визначення одержуємо таку крайову задачу:

$$\nabla^2 \eta_0 - \kappa^2 \eta_0 = 0, \quad (4)$$

$$\eta_0|_{\partial V} = \eta_a + \frac{\kappa_t^2}{\kappa^2} \theta_a \equiv \eta_L, \quad \lim_{x^2+y^2 \rightarrow \infty} |\eta_0| < \infty. \quad (5)$$

Якщо використати заміну змінних

$$x = R \left(\rho + \frac{m}{\rho} \right) \cos(\phi), \quad y = R \left(\rho - \frac{m}{\rho} \right) \sin(\phi), \quad (6)$$

то рівняння Гельмгольца (4) набуває вигляду

$$\rho^2 \frac{\partial^2 \eta_0}{\partial \rho^2} + \rho \frac{\partial \eta_0}{\partial \rho} + \frac{\partial^2 \eta_0}{\partial \phi^2} - \kappa^2 R^2 \left(\rho^2 + 2m \cos(2\phi) + \frac{m^2}{\rho^2} \right) \eta_0 = 0,$$

де $R = (a+b)/2$, $m = (a-b)/(a+b)$. Зазначимо, що така заміна змінних пов'язана з комплексним відображенням $z = R(\zeta + m/\zeta)$. Останнє рівняння допускає застосування методу розділення змінних [6]

$$\eta_0(\rho, \phi) = P(\rho) \Phi(\phi),$$

результатом чого є рівняння

$$\begin{aligned} \Phi'' + (\nu - 2q \cos(2\phi))\Phi &= 0, \\ \rho^2 P'' + \rho P' - \left(\kappa^2 R^2 \rho^2 + \nu + \frac{q^2}{\kappa^2 R^2 \rho^2} \right) P &= 0, \end{aligned} \quad (7)$$

де ν – стала, $q = -m\kappa^2 R^2$, штрих відзначає похідну за аргументом функції. У нових змінних рівняння межі тіла ∂V є $\rho = 1$, а область, яку воно займає, відображення у зовнішність одиничного кола.

Перше рівняння системи (7) – рівняння Мат'є. Для певних значень параметра ν його розв'язки будуть періодичними з періодом 2π . Тому це рівняння разом з вимогою 2π періодичності розв'язку є задачею на власні значення. Розв'язком цієї задачі є набори власних значень $\{\alpha_n\}_{n=0}^{\infty}$, $\{\beta_n\}_{n=1}^{\infty}$ та відповідних власних функцій – функцій Мат'є $\{\text{ce}_n(t)\}_{n=0}^{\infty}$, $\{\text{se}_n(t)\}_{n=1}^{\infty}$ [7], [8]. Оскільки $q < 0$, то для власних значень правильні нерівності $\alpha_0 < \alpha_1 < \beta_1 < \beta_2 < \alpha_2 < \alpha_3 < \beta_3 < \dots$. Зауважимо також, що при малих q або великих n виконується $\alpha_n \approx \beta_n \approx n^2$ і функції $\{\text{ce}_n(t)\}$, $\{\text{se}_n(t)\}$ близькі до $\{\cos(nt)\}$, $\{\sin(nt)\}$.

Для знаходження розв'язку другого рівняння (7) використаємо методику постійових наближень, запропоновану у [9]. Ввівши у розгляд змінну r та функцію $w(r)$ співвідношеннями

$$r = \kappa R \rho, \quad P(r) = \frac{e^{-r}}{\sqrt{r}} w(r), \quad (8)$$

це рівняння приводимо до вигляду

$$w'' - 2w' = \left(\frac{a_0}{r^2} + \frac{b_0}{r^4} \right) w, \quad (9)$$

де $a_0 = \nu - 1/4$, $b_0 = q^2$.

Рівнянню (9) відповідає інтегральне рівняння, яке, враховуючи обмеженість функції $P(r)$ на безмежності, має вигляд

$$\begin{aligned} w(r) &= A + \frac{1}{2} \int_r^{\infty} \left(1 - e^{2(r-v)} \right) \left(\frac{a_0}{v^2} + \frac{b_0}{v^4} \right) w(v) dv \equiv \\ &\equiv A + w_1(r), \end{aligned} \quad (10)$$

де A – довільна стала. Підставляючи зображення функції $w(r) = A + w_1(r)$ у це інтегральне рівняння та проводячи обчислення інтегралів від відомих функцій, маємо послідовно

$$\begin{aligned}
A + w_1(r) &= A + \frac{1}{2} \int_r^\infty \left(1 - e^{2(r-v)}\right) \left(\frac{a_0}{v^2} + \frac{b_0}{v^4}\right) (A + w_1(v)) dv, \\
w_1(r) &= \frac{A}{2} \int_r^\infty \left(1 - e^{2(r-v)}\right) \left(\frac{a_0}{v^2} + \frac{b_0}{v^4}\right) dv + \\
&\quad + \frac{1}{2} \int_r^\infty \left(1 - e^{2(r-v)}\right) \left(\frac{a_0}{v^2} + \frac{b_0}{v^4}\right) w_1(v) dv = \\
&= \frac{A}{6} (2e^{2r} (3a_0 + 2b_0) E_1(2r) + b_0(1/x^2 - 2/x)) + w_2(r) = \\
&= A \left(\frac{a_0}{2r} - \frac{a_0}{4r^2} + \frac{3a_0 + 2b_0}{12r^3} - \frac{3a_0 + 2b_0}{8r^4} + O(r^{-5}) \right) + w_2(r), \\
w_2(r) &= \frac{A}{12} \int_r^\infty \left(1 - e^{2(r-v)}\right) \left(\frac{a_0}{v^2} + \frac{b_0}{v^4}\right) (2e^{2v} (3a_0 + 2b_0) E_1(2v) + \\
&\quad + b_0(1/v^2 - 2/v)) dv + w_3(r) = \\
&= A \left(\frac{a_0^2}{4r^2} - \frac{a_0^2}{4r^3} + \frac{a_0(15a_0 + 8b_0)}{48r^4} + O(r^{-5}) \right) + w_3(r). \tag{11}
\end{aligned}$$

Тут $E_1(x)$ – інтегральна показникова функція.

Оскільки $w_k(r) = O(r^{-k})$, а для отворів, характерний розмір яких є більшим від характерного розміру області приповерхневої неоднорідності $r = \kappa R \rho \gg 1$, то, ґрунтуючись на (10), (11), одержуємо

$$\begin{aligned}
w(r) &= A \left(1 + \frac{a_0}{2r} + \frac{a_0(a_0 - 2)}{8r^2} + \frac{a_0^3 - 8a_0^2 + 12a_0 + 8b_0}{48r^3} + \right. \\
&\quad \left. + \frac{a_0^4 - 20a_0^3 + 108a_0^2 - 144a + 32a_0b_0 - 96b_0}{384r^4} + O(r^{-5}) \right).
\end{aligned}$$

На цій основі розв'язок другого рівняння системи (7) має вигляд

$$\begin{aligned}
P(r) &= \frac{Ae^{-r}}{\sqrt{r}} \left[1 + \frac{a_0}{2r} + \frac{a_0(a_0 - 2)}{8r^2} + \frac{a_0^3 - 8a_0^2 + 12a_0 + 8b_0}{48r^3} + \right. \\
&\quad \left. + \frac{a_0^4 - 20a_0^3 + 108a_0^2 - 144a + 32a_0b_0 - 96b_0}{384r^4} + O(r^{-5}) \right].
\end{aligned}$$

Оскільки ненульову константу A можна вибрати довільно, то підберемо її так, щоб $P(\kappa R) = 1$. Тоді

$$\eta_0(\rho, \phi) = \eta_L \left(C_0 \operatorname{ce}_0(\phi) P(\kappa R \rho; \alpha_0) + \sum_{n=1}^{\infty} C_n \operatorname{ce}_n(\phi) P(\kappa R \rho; \alpha_n) \right), \quad (12)$$

де C_n – коефіцієнти розкладення одиниці за функціями Мат'є, тобто

$$1 = C_0 \operatorname{ce}_0(\phi) + \sum_{n=1}^{\infty} C_n \operatorname{ce}_n(\phi), \quad C_n = \left(\int_0^{2\pi} \operatorname{ce}_n(t) dt \right) / \left(\int_0^{2\pi} \operatorname{ce}_n^2(t) dt \right), \quad n = 0, 1, 2 \dots$$

У кінцевому результаті розв'язок сформульованої задачі у змінних ρ, ϕ є таким:

$$\theta(\rho, \phi) = \theta_a, \quad \eta(\rho, \phi) = \left(\eta_a + \frac{\kappa_t^2}{\kappa^2} \theta_a \right) \sum_{n=0}^{\infty} C_n \operatorname{ce}_n(\phi) P(\kappa R \rho; \alpha_n) - \frac{\kappa_t^2}{\kappa^2} \theta_a. \quad (13)$$

Зазначимо, що для випадку кругової порожнини ($a = b$) з (13) для хімічного потенціалу $\eta^{(*)}$ одержуємо

$$\eta^{(*)}(\rho) = \left(\eta_a + \frac{\kappa_t^2}{\kappa^2} \theta_a \right) \frac{K_0(\kappa R \rho)}{K_0(\kappa R)} - \frac{\kappa_t^2}{\kappa^2} \theta_a,$$

де K_0 – функція Макдональда першого порядку.

Аналіз одержаного розв'язку свідчить про те, що при сталій температурі для довільного $\phi = const$ збурення хімічного потенціалу за абсолютною величиною монотонно зменшується при відході від поверхні ∂V у глибину тіла. Порівняння чисельних результатів для одержаного розв'язку з розв'язком відповідної задачі для $a = b$ показує, що відмінність у значенні хімічного потенціалу при відході від поверхні зростає до свого екстремального значення і далі монотонно прямує до нуля.

Одержані результати можна покласти в основу вивчення напруженено-деформованого стану тіла для різних умов силового навантаження.

Робота виконана за часткової фінансової підтримки Фонду фундаментальних досліджень Міністерства освіти і науки України.

1. Бурак Я. И., Нагирный Т. С., Грицина О. Р., Червинка К.А. Поверхностные напряжения в слое. Влияние температуры и примесей на прочность// Проблемы прочности. – 2000. – N 6. – С. 35-43.
2. Нагірний Т. С., Червінка К. А. Поверхневі напруження в шарі. Вплив температури на приповерхневий натяг та міцність// Доп. НАН України. – 2000. – N 10. – С. 57-62.
3. Нагірний Т. С., Червінка К. А. Моделювання хвильових процесів у деформізованих твердих тілах з врахуванням ефектів приповерхневої неоднорідності // Вісн. Львів. ун-ту. Сер. мех.-мат. – 1999. – Вип. 54. – С. 117-124.

4. Нагірний Т. С. Поверхневі напруження в шарі. Поверхневий натяг та міцність шару //Мат. методи та фіз.-мех. поля. – 1999. – Т. 42. – N 4. - С. 111-115.
5. Нагірний Т. С., Грицина О. Р. Вплив домішок на приповерхневу неоднорідність та міцність шару в процесі його насичення // Доп. НАН України. – 2001. - N 4. – С. 51-57.
6. Перестюк М. О., Маринець В. В. Теорія рівнянь математичної фізики. – К., 2001.
7. Янке Е., Эмде Ф., Лёш Ф. Специальные функции. – М., 1968.
8. Никифоров А. Ф., Уваров В. Б. Специальные функции математической физики. – М., 1984.
9. Замалетдинова Ф. І. Методи розв'язування диференціальних рівнянь. – Львів, 1961.

**ON CHEMICAL POTENTIAL IN TWO-DIMENTIONAL PROBLEMS
OF LOCAL GRADIENT SOLID**

Taras Nahirnyy¹, Kostyantyn Tchervinka²

¹Center of mathematical modeling,
Dudayeva Str., 15 79005 Lviv, Ukraine

²Ivan Franko National University of Lviv,
Universitetska Str., 1 79000 Lviv, Ukraine

The paper is devoted to methods of investigation of two-dimensional chemical potential and temperature fields in the local gradient model of solids. The stationary state of infinite plane with an elliptical shape hole is under consideration. The boundary values of chemical potential and temperature are taken to be constant along the ellipse. The natural constraints in infinite point are finiteness of solution. The solution is found with use of variable separation method applied to equation, rewritten in new variable system that is derived from conformal mapping onto a circle. It is shown that for the ellipse being a circle the solution is same as in one-dimensional problem.

Key words: local gradient thermoelastic bodies, chemical potential.

Стаття надійшла до редколегії 23.06.2004

Прийнята до друку 03.11.2004