

# REVISIÓN DE MODELOS DE CONDUCCIÓN DEL CALOR Y DE DIFUSIÓN EN SÓLIDOS MICROESTRUCTURADOS Y EN METAMATERIALES I: ECUACIONES CONSTITUTIVAS Y DE CONSERVACIÓN-BALANCE

## REVIEW OF HEAT CONDUCTION AND DIFFUSION MODELS IN MICROSTRUCTURED SOLIDS AND METAMATERIALS I: CONSTITUTIVE AND CONSERVATION-BALANCE EQUATIONS

Juan C. Barreto<sup>a</sup>, Javier L. Mröginski<sup>b</sup> y Héctor A. Di Rado<sup>b</sup>

<sup>a</sup>Laboratorio de Modelización y Simulación Numérica, Universidad Nacional de Formosa, Av. Gutnisky  
3200, 3600 Formosa, Formosa, Argentina, <http://www.unf.edu.ar>

<sup>b</sup>Laboratorio de Mecánica Computacional, Universidad Nacional del Nordeste LAMEC - IMIT  
(CONICET), Av. Las Heras 727, 3500 Resistencia, Chaco, Argentina

**Palabras clave:** Modelos de conducción del calor no Fourier, micro temperaturas, micro-estructuras.

**Resumen.** En el presente trabajo se recorre en apretada síntesis un grupo de modelos de conducción del calor, y de difusión, en sólidos con micro-estructuras (S. Forest y E.C. Aifantis, *Int J Solids Struct*, 47(25):3367–3376 (2010)), y en Metamateriales, clasificados genéricamente como Sistemas de Onsager (G. Nika, *Mod Phys Lett B*, 37(11):2350011 (2023)), poniendo especial énfasis en la construcción de sus ecuaciones constitutivas, y en la definición de sus ecuaciones de conservación balance en cada caso. Las microestructuras consideradas son: inclusiones y defectos, en medios cristalinos. Los Metamateriales considerados son de tipo micromórficos (P. Neff et al., *Contin Mech Thermodyn* (2013)).

**Keywords:** Non-Fourier heat conduction, microtemperatures, second gradient elasticity theory.

**Abstract.** In the present work, a group of models of heat conduction and diffusion in solids with microstructures (S. Forest and E.C. Aifantis, *Int J Solids Struct*, 47(25):3367–3376 (2010)), and in Metamaterials, generically classified as Onsager Systems (G. Nika, *Mod Phys Lett B*, 37(11):2350011 (2023)), is reviewed in a tight synthesis, placing special emphasis on the construction of their constitutive equations, and on the definition of their balance conservation equations in each case. The microstructures considered are: inclusions and defects, in crystalline media. The metamaterials considered are micromorphic (P. Neff et al., *Contin Mech Thermodyn* (2013)).

## 1. INTRODUCCIÓN

En este trabajo se analizan las principales líneas teóricas en relación con fenómenos y procesos de conducción del calor y difusión de especies químicas en materiales Microestructurados y en Metamateriales de tipo micromórficos, desde la perspectiva de Onsager y Mielke–Roubicek, es decir introduciendo una categoría relativamente nueva de operadores como lo son los de tipo disipativos, los cuales, en general satisfacen alguna condición entrópica. Desde un punto de vista geométrico, los operadores de Onsager son estructuras que pueden definirse en la forma siguiente, se trata de una tripleta de objetos

$$(\mathbf{X}, \Phi, \mathbf{K}); u \in \mathbf{X}, \Phi: \mathbf{X} \rightarrow R \cup \{\infty\}; \mathbf{K}(u): \mathbf{X}^* \rightarrow \mathbf{X}$$

donde  $\mathbf{X}$  es el Espacio de estados, contiene a  $u$ ,  $\mathbf{K}(u)$  es un operador lineal simétrico y definido positivo se conoce como operador de Onsager. El espacio de estados  $\mathbf{X}$ , se asume definido sobre un Espacio de Banach reflexivo con dual  $\mathbf{X}^*$ .

Los sistemas de Onsager describen sistemas débilmente alejados del equilibrio termodinámico, de modo que naturalmente se expresan con objetos formales cuasi-lineales, o no lineales, en general. Contienen, además, términos disipativos, lo cual define un modo de evolución acoplado a una estructura adicional llamada inclusión diferencial, u operador sub-diferencial.

## 2. SISTEMAS DE ONSAGER

Se expresa formalmente un sistema de Onsager, en la forma siguiente:

- Definición de conservación del flujo de entropía

$$s = s(u, \mathbf{q}_j); \partial_t s(u, \mathbf{q}_j) + D_k \mathbf{J}_k^s = \sigma > 0$$

$D_k$  – Operador diferencial generalizado

- Estructura del sistema de Onsager con un término de disipación

$$\mathbf{q}_j(\vec{x}, t) = -\mathbf{K}_{jk}(u) D_k \{\Phi(u(\vec{x}, t))\} - D_j \psi(u) \quad (1)$$

$$\partial_t \xi(u(\vec{x}, t)) = -D_j \mathbf{q}_j(\vec{x}, t); \partial_t \psi(u) \ni \|D_k j\|; \psi - \text{sub-diferencial} \quad (2)$$

$$\mathbf{K}_{jk}(u) \in (V(R_k))^{3 \times 3}; \mathbf{K}_{jk}(u) = \mathbf{K}_{jk}(u); \mathbf{q}_j \in (L^2(R_k))^3 \quad (3)$$

$j$  – flujo disipativo

Una generalización inmediata podría escribirse en la forma siguiente

- Definición de conservación del flujo de entropía

$$s = s(u, \mathbf{q}_j); \partial_t s(u, \mathbf{q}_j) + D_k \mathbf{J}_k^s = \sigma > 0$$

- Estructura del sistema de Onsager con memoria

$$\mathbf{q}_j(\vec{x}, t) = -\mathbf{K}_{jk}(u) D_k (\Phi(u(\vec{x}, t))) - (g(t - \tau) \circ (\mathbf{K}_{jk}(u) D_k \Psi(u(\vec{x}, \tau)))) - D_j \psi(u) \quad (4)$$

$$\partial_t \xi(u(\vec{x}, t)) = -D_j \mathbf{q}_j(\vec{x}, t); \partial_t \psi(u) \ni \|D_k j\|; g \in L^2(R_k^+) \quad (5)$$

### 3. SISTEMAS DE GRADIENTES

Los sistemas gradientales, o simplemente de gradientes son equivalentes a los sistemas de Onsager, en estos se define explícitamente la forma del operador derivación

- Definición de conservación del flujo de entropía

$$s = s(u, \mathbf{q}_j) ; \partial_t s(u, \mathbf{q}_j) + \mathbf{J}_{k,k}^s = \sigma > 0$$

- Estructura de Gradientes sin disipación

$$\mathbf{q}_j(\vec{x}, t) = -\mathbf{K}_{jk}(u)(\Phi(u(\vec{x}, t)))_{,k} ; \partial_t u(\vec{x}, t) = -\mathbf{q}_{j,j}(\vec{x}, t)$$

A continuación, se escribe el sistema de gradientes que acopla un campo visco-elastodinámico micro-estructurado conteniendo inclusiones en el sentido de Eshelby-Mura, y s-campos escalares utilizando la técnica de gradientes

$$s = s(u_s, \mathbf{q}_j, u_j, \dot{u}_j) ; \partial_t s(u_s, \mathbf{q}_j, u_j, \dot{u}_j) + \mathbf{J}_{k,k}^s = \sigma > 0 \quad (6)$$

$$\partial_t u_s(\vec{x}, t) + \sum_{s=1}^m \alpha_s \mathbf{M}_{j,k}^s \dot{u}_{j,k}(\vec{x}, t) = -\mathbf{q}_{j,j}^s(\vec{x}, t) \quad (7)$$

$$\mathbf{q}_j^s(\vec{x}, t) = -\mathbf{K}_{jk}^s(u_s)(\Phi(u_s(\vec{x}, t)))_{,k} \quad (8)$$

Ecuaciones constitutivas y de conservación balance

$$\boldsymbol{\sigma}_{jk}(\vec{x}, t) = \mathbf{C}_{jklm} u_{l,m}(\vec{x}, t) + \mathbf{C}_{jklm}^v \dot{u}_{l,m}(\vec{x}, t) - \sum_{s=1}^p \alpha_s \{ \mathbf{M}_{jk}^s \Phi(u_s(\vec{x}, t)) \} \quad (9)$$

$$\partial_t u_j(\vec{x}, t) + \boldsymbol{\sigma}_{jk,k}(\vec{x}, t) = 0 \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \partial_t \boldsymbol{\sigma}_{jk}(\vec{x}, t) + \mathbf{C}_{jklm} u_{l,m}(\vec{x}, t) + \mathbf{C}_{jklm}^v \dot{u}_{l,m}(\vec{x}, t) - \sum_{s=1}^p \alpha_s \mathbf{M}_{jk}^s u_s(\vec{x}, t) = \\ = -\mathbf{S}_{jklm}^{Es}(\vec{x}, t) \boldsymbol{\epsilon}_{lm}^*(\vec{x}, t) \end{aligned} \quad (11)$$

Las matrices asociadas a los tensores de cuarto y de segundo orden verifican las siguientes propiedades y son todas definidas positivas

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_{jklm}^e, \mathbf{C}_{jklm}^v, \mathbf{S}_{jklm}^{Es} \in V^{3 \times 3 \times 3 \times 3} ; \mathbf{C}_{jklm}^{e,v} = \mathbf{C}_{kjlm}^{e,v} = \mathbf{C}_{jkm}^{e,v} = \mathbf{C}_{lmjk}^{e,v} \\ \mathbf{S}_{jklm}^{Es} = \mathbf{S}_{kjlm}^{Es} = \mathbf{S}_{jkm}^{Es} ; \mathbf{M}_{jk}^s \in V^{3 \times 3} ; \mathbf{M}_{jk}^s = \mathbf{M}_{kj}^s ; \alpha_s \in R_0^+ \end{aligned}$$

E. Aifantis propone una quimio-elasticidad, asociada a un sistema bifásico ion-litio, la cual también puede escribirse en términos de un sistema de gradientes en la forma siguiente:

$$\mathbf{J}_j(\vec{x}, t) = -\mathbf{D}_{jk} c_{,k}(\vec{x}, t) - (\mathbf{N}_{ik} \sigma_{i,k}(\vec{x}, t))_{,j} ; \partial_t c(\vec{x}, t) + \mathbf{J}_{j,j}(\vec{x}, t) = 0 \quad (12)$$

$$\begin{aligned} \psi(c, \hat{\nabla} c, \varepsilon_{jk}, tr \varepsilon_{jk}) = f(c) + (1/2) c_{,j} \mathbf{K}_{jk} c_{,k} + (1/2) \varepsilon_{jk}^s \mathbf{C}_{jklm}^e \varepsilon_{lm}^s + \\ + (1/2) \varepsilon_{jk,n}^s \mathbf{C}_{jklm}^e \varepsilon_{lm,n}^s ; \varepsilon_{jk}^s = \varepsilon_{jk} - \bar{c} \mathbf{M}_{jk} \quad \bar{c} = c/c_{max} / 0 \leq \bar{c} \leq 1 \end{aligned} \quad (13)$$

$\mathbf{M}_{jk}$  Tensor de acoplamiento de fases;  $\mathbf{M}_{jk}, \mathbf{K}_{jk} \in V^{3 \times 3}$  simétricos.

$$f(c) = \mu^0 c + R\theta c_{max} \{ \bar{c} \ln \bar{c} + (1 - \bar{c}) \ln(1 - \bar{c}) \} + R\theta c_{max} \alpha \bar{c} (1 - c_{max})$$

$R$ : Constante de los gases;  $\theta$ : Temperatura;  $\mu^0$ : Potencial de referencia de  $\mu$

$$\sigma_{jk} = 2G\varepsilon_{jk} + \lambda tr\varepsilon_{jj} - l_1^2((2G + 3\lambda)/3)\hat{\nabla}^2 tr\varepsilon_{jj}\mathbf{1}_{jk} - (2G + 3\lambda)\bar{M}_0(c - l_1^2\hat{\nabla}^2 c)\mathbf{1}_{jk} \quad (14)$$

Neff et al. (2013); Khurana et al. (2018) introducen un meta-material de tipo micromórfico, que difiere del propuesto por Eringen (1968), en el sentido de que este último propone la existencia de un campo escalar de stretch, que, junto con el campo vectorial de micro-rotaciones (micro-polaridad en el sentido de Cosserat) define la cualidad de micromórfico al material, cuyas propiedades fueran compatibles con esta formulación, en cambio, los primeros autores mencionados, introducen un campo tensorial de segundo orden llamado campo de micro-distorsiones y cuatro tensores de cuarto orden los cuales son:

1. El tensor elástico de cuarto orden clásico  $\{C_{jklm}^e; sim(\varepsilon_{jk})\}$
2. El tensor de micro-polaridad  $\{C_{jklm}^c; ans(\varepsilon_{jk})\}$  acoplado a la componente antisimétrica del tensor de deformaciones
3. Un tensor de cuarto orden micro-elástico  $\{C_{jklm}^{micro}; sim(\mathbf{P}_{jk})\}$
4. Un tensor de cuarto orden de micro-distorsiones  $\{L_{jklm}^c; \alpha_{jk}\}$

Se definen sus variables descriptoras en la forma:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{jk} &= u_{j,k} - \mathbf{P}_{jk}; \mathbf{P}_{jk} = \mathbf{P}_{kj}; \alpha_{jk} = -\varepsilon_{jlm}\mathbf{P}_{km,l} \\ C_{jklm}^e, C_{jklm}^c, C_{jklm}^{micro}, L_{jklm}^c &\in V^{3 \times 3 \times 3 \times 3}; C_{jklm}^e = C_{kjlm}^e = C_{lmkj}^e \\ C_{jklm}^{micro} &= C_{kjlm}^{micro} = C_{lmjk}^{micro}; L_{jklm}^c = L_{lmjk}^c; C_{klmn}^c = C_{mnlk}^c = -C_{lkmn}^c \end{aligned}$$

La función de energía micromórfica, asociada a un campo de temperaturas será: (Khurana et al., 2018)

$$\begin{aligned} \Sigma(\varepsilon_{jk}, \mathbf{P}_{jk}, \alpha_{jk}, T) &= (1/2)sim(\varepsilon_{jk})C_{jklm}^e sim(\varepsilon_{lm}) + \\ &+ (1/2)ans(\varepsilon_{jk})C_{jklm}^c ans(\varepsilon_{ml}) + (1/2)(sim\mathbf{P}_{jk})C_{jklm}^{micro}(sim\mathbf{P}_{lm}) - \mathbf{A}_{jk}T sim(\varepsilon_{jk}) - \\ &- \mathbf{G}_{jk}T ans(\varepsilon_{jk}) - \mathbf{B}_{jk}T sim(\mathbf{P}_{jk}) - \mathbf{D}_{jk}T \alpha_{jk} + (1/2)\alpha_{jk}L_{jklm}^c \alpha_{lm} + V_e(t, T) \quad (15) \end{aligned}$$

$$V = \Sigma_0 + \eta_0 \rho_0 T - (\rho_0 C_0 / 2T_0) T^2 \quad (16)$$

$$\Psi = (1/2)T_{,j} \mathbf{K}_{jk} T_{,k} \quad \mathbf{K}_{jk} \in V^{3 \times 3}; \mathbf{K}_{jk} = \mathbf{K}_{kj} \quad (17)$$

Las relaciones constitutivas serán:

$$ant(\sigma_{jk}) = \frac{\partial \Sigma(\varepsilon_{jk}, \mathbf{P}_{jk}, \alpha_{jk}, T)}{\partial (ant(\varepsilon_{jk}))} = -\mathbf{G}_{jk}T + C_{jklm}^c ant(\varepsilon_{lm}) \quad (18)$$

$$\mathbf{s}_{jk} = \frac{\partial \Sigma(\varepsilon_{jk}, \mathbf{P}_{jk}, \alpha_{jk}, T)}{\partial (sim(\mathbf{P}_{jk}))} = -\mathbf{B}_{jk}T + C_{jklm}^{micro} sim(\mathbf{P}_{lm}) \quad (19)$$

$$\mathbf{m}_{jk} = \frac{\partial \Sigma(\varepsilon_{jk}, \mathbf{P}_{jk}, \alpha_{jk}, T)}{\partial \alpha_{jk}} = -\mathbf{D}_{jk}T + L_{jklm}^c \alpha_{lm} \quad (20)$$

$$sim(\sigma_{jk}) = \frac{\partial \Sigma(\varepsilon_{jk}, \mathbf{P}_{jk}, \alpha_{jk}, T)}{\partial (sim(\varepsilon_{jk}))} = -\mathbf{A}_{jk}T + C_{jklm}^e sim(\varepsilon_{lm}) \quad (21)$$

$$\mathbf{q}_j = \frac{\partial \Psi(\mathbf{K}_{jk}, T)}{\partial \alpha_{jk}} = (1/T_0)\mathbf{K}_{jk} T_{,k} \quad (22)$$

$$\begin{aligned} \eta &= -(1/\rho_0) \frac{\partial \Sigma(\varepsilon_{jk}, \mathbf{P}_{jk}, \alpha_{jk}, T)}{\partial T} = \eta_0 + (C_0/T_0)T + \\ &+ (1/\rho_0) \{ \mathbf{A}_{jk} sim(\varepsilon_{jk}) + \mathbf{G}_{jk} ant(\varepsilon_{jk}) + \mathbf{B}_{jk} sim(\mathbf{P}_{jk}) + \mathbf{D}_{jk} \alpha_{jk} \} \quad (23) \end{aligned}$$

#### 4. FLUJO DE DIFUSIÓN MOLECULAR

Utilizando la ley de Fick podemos escribir el sistema de gradientes la difusión molecular;  $D_{jk}$ : Tensor de difusión anisótropo,  $c$ : campo de concentraciones;  $\varphi$  - potencial químico

$$\mathbf{J}_j(\vec{x}, t) = -\mathbf{D}_{jk}c_{,k}(\vec{x}, t) ; \partial_t \varphi(c(\vec{x}, t)) + \mathbf{J}_{j,j}(\vec{x}, t) = 0$$

En la formulación de segundo gradiente (Aifantis, 1979, 1999)

$$\mathbf{\Pi}_k(\vec{x}, t) = (1 - l_1^2 \hat{\nabla}^2) \mathbf{J}_j(\vec{x}, t)$$

$$\mathbf{\Pi}_k(\vec{x}, t) = -\mathbf{D}_{jk}(1 - l_1^2 \hat{\nabla}^2)c_{,k}(\vec{x}, t) ; \partial_t \varphi(c(\vec{x}, t)) + \mathbf{\Pi}_{k,j,j}(\vec{x}, t) = 0$$

##### 4.1. Flujo advectivo-difusivo de especies químicas en el seno de un fluido

$$\mathbf{J}_j(\vec{x}, t) = -\mathbf{D}_{jk}c_{,k}(\vec{x}, t) + v_j c(\vec{x}, t) ; \partial_t \varphi(c(\vec{x}, t)) + \mathbf{J}_{j,j}(\vec{x}, t) = 0$$

#### 5. FLUJO DE CALOR

Las teorías de conducción del calor pueden clasificarse genéricamente en modelos parabólicos, e hiperbólicos o no Fourier, realizamos una breve síntesis de los modelos difusivos de tipo Fourier

$$s = s(T, \mathbf{q}_j) ; \partial_t s(T, \mathbf{q}_j, \vec{x}, t) + \mathbf{J}_{k,k}^s = \sigma > 0$$

$$\mathbf{q}_j(\vec{x}, t) = -\mathbf{K}_{jk}(T)(u(T, t))_{,k} ; \partial_t u(T, t) = -\mathbf{q}_{j,j}(\vec{x}, t)$$

$\mathbf{K}_{jk}$ : tensor de conductividad térmica anisótropa,  $T$ : campo de temperaturas,  $u(T, t)$ : función densidad de energía interna,  $s$ : función densidad de entropía.

K. Showalter y colaboradores desde 2003 analizan ciertas ecuaciones de conducción del calor o más generalmente ciertos operadores parabólicos llamados histeréticos o con histéresis

$$\mathbf{q}_j(\vec{x}, t) = -\mathbf{K}_{jk}T_{,k}(\vec{x}, t) ; \partial_t u(T(\vec{x}, t)) + \mathbf{q}_{j,j}(\vec{x}, t) = \partial_t \mathcal{H}(\vec{x}, t)$$

$\mathbf{K}_{jk}$  tensor de conductividad térmica anisótropa,  $T$ : campo de temperaturas,  $u$ : función de energía interna,  $\mathcal{H}$ : función de histéresis.

La generalización Fourier de la teoría de segundo gradiente, ahora aplicada a un operador parabólico puede escribirse en la forma (Aifantis, 2016)

$$\mathbf{q}_j(\vec{x}, t) = -\mathbf{K}_{jk}(1 - l_1^2 \hat{\nabla}^2)T_{,k}(\vec{x}, t) ; \partial_t u(T, t) + \mathbf{q}_{j,j}(\vec{x}, t) = \partial_t D(\vec{x}, t)$$

$\mathbf{K}_{jk}$  tensor de conductividad térmica anisótropa,  $T$ : campo de temperaturas,  $u$ : función de energía interna,  $D$ : función de disipación.

#### 6. MODELO DE GUYER KRUMHANSL

El modelo G-K, es una primera generalización de una serie de modelos hiperbólicos, basados en la estructura de Cattaneo-Vernotte, en este caso cuando se supone una distribución de temperaturas en el seno de un superfluido o en medios moleculares diluidos (sin disipación)

$$\tau \partial_t \mathbf{q}_j(\vec{x}, t) + \mathbf{q}_j(\vec{x}, t) = -\mathbf{K}_{jk}T_{,k}(\vec{x}, t) + l_1^2 (\hat{\nabla}^2 \mathbf{q}_j(\vec{x}, t) + 2\hat{\nabla}(\hat{\nabla} \mathbf{q}_k(\vec{x}, t)))$$

$$\partial_t u(T(\vec{x}, t)) + \mathbf{q}_{j,j}(\vec{x}, t) = 0$$

## 6.1. Modelo de Guyer Krumhansl, en un medio micro-estructurado

El sistema G-K a dos escalas

$$\begin{aligned} \tau \partial_t \mathbf{q}_j(\vec{x}, t) + \mathbf{q}_j(\vec{x}, t) &= -\mathbf{K}_{jk} T_{,k}(\vec{x}, t) + l_1^2 (1 - l_2^2 \hat{\nabla}^2) \hat{\nabla}^2 \mathbf{q}_j(\vec{x}, t) + 2 \hat{\nabla} \cdot ((1 - l_2^2 \hat{\nabla}^2) \hat{\nabla} \mathbf{q}_k(\vec{x}, t)) \\ \partial_t u(T(\vec{x}, t)) + \mathbf{q}_{j,j}(\vec{x}, t) &= 0 \end{aligned}$$

## 6.2. Flujo de calor balístico-difusivo

También llamado modelo de Anisimov. Propagación en el orden de micro y nano-escalas (Sellitto et al., 2016). Dos flujos de fonones  $\mathbf{q}_j^s$  y  $\mathbf{q}_j^f$

$$\begin{aligned} \tau_b \partial_t \mathbf{q}_j^b(\vec{x}, t) + \mathbf{q}_j^b(\vec{x}, t) &= -\mathbf{K}_{jk}^b T_{,k}^b(\vec{x}, t) + l_b^2 (\hat{\nabla}^2 \mathbf{q}_j^b(\vec{x}, t) + 2 \hat{\nabla} \cdot (\hat{\nabla} \mathbf{q}_k^b(\vec{x}, t))) \\ \tau_b \partial_t \mathbf{q}_k^d(\vec{x}, t) + \mathbf{q}_{j,j}^d(\vec{x}, t) &= -\mathbf{K}_{jk}^d T_{,k}^d(\vec{x}, t) \\ \partial_t u_b(\vec{x}, t) + \mathbf{q}_{j,j}^b(\vec{x}, t) &= r_b(\vec{x}, t) ; \partial_t u_d(\vec{x}, t) + \mathbf{q}_{j,j}^d(\vec{x}, t) = r_d(\vec{x}, t) \end{aligned}$$

Eliminando los flujos obtenemos el Sistema hiperbólico acoplado de dos temperaturas

$$\tau_d \partial_t^2 T_d(\vec{x}, t) - a_d^2 \hat{\nabla}^2 T_d(\vec{x}, t) - \xi_{1d}^2 T_d(\vec{x}, t) + \partial_t T_d(\vec{x}, t) - \xi_{2d}^2 \partial_t T_d(\vec{x}, t) = 0 \quad (24)$$

$$a_d^2 = \lambda_d / c_d ; \xi_{1d}^2 = 1 / \tau_b ; \xi_{2d}^2 = \tau_d / \tau_b$$

$$\begin{aligned} \tau_b \partial_t^2 T_b(\vec{x}, t) - a_b^2 \hat{\nabla}^2 T_d(\vec{x}, t) - 3l_b^2 \hat{\nabla} \cdot (\hat{\nabla} (\partial_t T_d(\vec{x}, t) + \eta \hat{\nabla} T_d(\vec{x}, t))) + 2 \partial_t T_b(\vec{x}, t) + \\ + (1 / \tau_b) T_b(\vec{x}, t) = 0 \quad (25) \end{aligned}$$

$$a_b^2 = \lambda_b / c_b ; \xi_{1b}^2 = 1 / \tau_b ; \eta = 1 / \tau_b$$

## 7. JERARQUÍA DE TEMPERATURAS EN NANO-SISTEMAS TEORÍA DE MÚLTIPLES TEMPERATURAS EN MÚLTIPLES ESCALAS

Sellitto et al. (2016) proponen un modelo jerárquico de múltiples escalas, en la forma de un proceso tipo Birth-death vectorial, en la forma siguiente:

$$s = s(u, \mathbf{J}_1, \mathbf{J}_2, \dots, \mathbf{J}_n) = s(u) + (\alpha_1 / 2) (\mathbf{J}_1 : \mathbf{J}_2) + \dots + (\alpha_n / 2) (\mathbf{J}_n : \mathbf{J}_n)$$

$$\mathbf{J}^s = \mathbf{J}_1 / T + \beta_1 (\mathbf{J}_2 \cdot \mathbf{J}_1) + \dots + \beta_{n-1} (\mathbf{J}_n \cdot \mathbf{J}_{n-1})$$

$$\partial_t s + \mathbf{J}_{j,j}^s = \sigma > 0$$

$$\tau_1 \partial_t \mathbf{J}_{1j}(\vec{x}, t) + \mathbf{J}_{1j}(\vec{x}, t) = -\lambda_1 T_{,k}(\vec{x}, t) - \frac{\beta_1 \tau_1}{\alpha_1} \mathbf{J}_{2j}(\vec{x}, t)$$

⋮

$$\tau_n \partial_t \mathbf{J}_{nj}(\vec{x}, t) + \mathbf{J}_{nj}(\vec{x}, t) = \frac{\beta_n \tau_n}{\alpha_n} \mathbf{J}_{n+1j}(\vec{x}, t) - \frac{\beta_{n-1} \tau_n}{\alpha_n} \mathbf{J}_{n-1j}(\vec{x}, t)$$

$$\partial_t \mathbf{J}_k(\vec{x}, t) + \mathbf{J}_{k+1}(\vec{x}, t) = \mathbf{P}_k ; \beta_k = -\alpha_k ; k = 1, 2, \dots, n$$

$$\mathbf{P}_k = -\frac{1}{\tau_k} \mathbf{J}_k(\vec{x}, t) + \frac{\beta_{k-1}}{\beta_k} \hat{\nabla} \cdot \mathbf{J}_{k-1}(\vec{x}, t)$$

$\mathbf{J}_k(\vec{x}, t) \cdot \mathbf{J}_{k-1}(\vec{x}, t)$  es una notación de indica la contracción sobre los  $k - 1$  índices de  $\mathbf{J}_k(\vec{x}, t)$ , dando un vector como resultado

## 8. MODELOS DE TIPO GREEN NAGHDI

Son modelos que utilizan una definición diferente respecto del gradiente de temperaturas que ahora se define como desplazamiento térmico, por ejemplo, el modelo tipo II (existen tres modelos termo-elásticos) tiene la siguiente estructura

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_j(\vec{x}, t) &= -\mathbf{K}_{jk}v_{,k}(\vec{x}, t) ; v = \partial_t T(\vec{x}, t) \\ \rho c_v \partial_t T(\vec{x}, t) + \mathbf{J}_{j,j}(\vec{x}, t) + T_0 \beta_{jk} \dot{u}_{j,k} &= \rho Q(x, t) \end{aligned}$$

La distribución de temperaturas será

$$\rho c_v \partial_t^2 T(\vec{x}, t) - (\tilde{\mathbf{K}}_{jk} T_{,k}(\vec{x}, t))_{,j} + T_0 \beta_{jk} \ddot{u}_{j,k} = \rho \dot{Q}(x, t)$$

En el modelo tipo III

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_j(\vec{x}, t) &= -\mathbf{K}_{jk} T_{,k} - \tilde{\mathbf{K}}_{jk} v_{,k}(\vec{x}, t) ; v = \partial_t T(\vec{x}, t) \\ \rho c_v \partial_t T(\vec{x}, t) + \mathbf{J}_{j,j}(\vec{x}, t) + T_0 \beta_{jk} \dot{u}_{j,k} &= \rho Q(x, t) \\ \rho c_v \partial_t^2 T(\vec{x}, t) - (\tilde{\mathbf{K}}_{jk} T_{,k}(\vec{x}, t))_{,j} - (\mathbf{K}_{jk} \dot{T}_{,k}(\vec{x}, t))_{,j} + T_0 \beta_{jk} \ddot{u}_{j,k} &= \rho \dot{Q}(x, t) \end{aligned}$$

## 9. FLUJO DE PRESIONES EN UN MEDIO POROSO

El modelo de Darcy satisface también un sistema de Onsager en la forma siguiente

$$\mathbf{J}_j(\vec{x}, t) = -\mathbf{K}_{jk}^p p_{,k}(\vec{x}, t) ; \partial_t \psi(p(\vec{x}, t)) + \mathbf{J}_{j,j}(\vec{x}, t) = 0$$

$\mathbf{K}_{jk}^p$ : tensor de permeabilidad,  $p$ : distribución de presiones de poro o simplemente porosidad,  $\psi$ : función de porosidad.

### 9.1. Flujo de presiones en un medio poroso en la formulación de segundo gradiente, con un término de viscosidad

El modelo generalizado de Darcy satisface nuevamente el siguiente sistema de Onsager

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_j(\vec{x}, t) &= -\mathbf{K}_{jk}^p (1 + l_1^2 \hat{\nabla}^2) p_{,k}(\vec{x}, t) - \tilde{\mathbf{K}}_{jk}^p (1 + l_1^2 \hat{\nabla}^2) \dot{p}_{,k}(\vec{x}, t) \\ \partial_t \psi(p(\vec{x}, t)) + \mathbf{J}_{j,j}(\vec{x}, t) &= 0 \end{aligned}$$

### 9.2. Flujo molecular en un medio poroso conteniendo inclusiones en el sentido de Eshelby

[Dormieux et al. \(2006\)](#) proponen un modelo que considera el proceso difusivo acoplado a un campo de defectos en la forma siguiente

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_j(\vec{x}, t) &= -\mathbf{D}_{jk} c_{,k}(\vec{x}, t) + \mathbf{j}_j^I(\vec{x}, t) \chi_I(\vec{x}) ; \partial_t \varphi(c(\vec{x}, t)) + \mathbf{J}_{j,j}(\vec{x}, t) = 0 \\ \mathbf{j}_j^I(\vec{x}, t) &= -(\delta \mathbf{D} \chi_I(\vec{x}))_{jk} c_{,k}(\vec{x}, t) ; c(\vec{x}, t) \rightarrow H_j x_j ; |x_j| \rightarrow \infty \end{aligned}$$

$H_j$ : Gradiente de concentraciones prescrito en la frontera del RVE.  $\chi_I$ : función característica en el dominio de la inclusión.

## 10. TERMO-DIFUSIÓN A FLUJOS CRUZADOS

$\chi_{jk}$ : tensor de sensibilidad concentración-temperatura

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_j(\vec{x}, t) &= -\mathbf{D}_{jk}^{(1)} c_{1,k}(\vec{x}, t) - \mathbf{D}_{jk}^{(2)} c_{2,k}(\vec{x}, t) - \chi_{jk}(c_1, c_2, T) T_{,k}(\vec{x}, t) \\ \mathbf{q}_j(\vec{x}, t) &= -\mathbf{K}_{jk} T_{,k}(\vec{x}, t) - \chi_{jk}(c_1, c_2, T) \{c_{1,k}(\vec{x}, t) + c_{2,k}(\vec{x}, t)\} \\ \partial_t \varphi_1(c_1(\vec{x}, t)) + \mathbf{J}_{j,j}(\vec{x}, t) &= 0 ; \partial_t \varphi_2(c_2(\vec{x}, t)) + \mathbf{J}_{j,j}(\vec{x}, t) = 0 \\ \partial_t u(T(\vec{x}, t)) + \mathbf{q}_{j,j}(\vec{x}, t) &= 0 \end{aligned}$$

### 10.1. Modelos de Cahn-Hilliard y Allen-Cahn respectivamente

Para el análisis de procesos difusivos con cambio de fase, Cahn-Hilliard proponen el siguiente sistema de gradientes:

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_j(\vec{x}, t) &= -\mathbf{D}_{jk}^{(d)}(c)\mu_{,k}(c, \hat{\nabla}c) / \mu = -\alpha \hat{\nabla}^2 c(\vec{x}, t) + f(u) \\ \partial_t c(\vec{x}, t) + \mathbf{J}_{j,j}(\vec{x}, t) &= 0 \end{aligned}$$

La ecuación de Allen Cahn describe la separación de fases en aleaciones binarias, pueden ser generalizada, esta ecuación a sistemas de ecuaciones de reacción difusión para mezclas multi componente:

$$\begin{aligned} \partial_t u(\vec{x}, t) &= -\frac{\delta}{\delta u} E(u, \Omega) \quad ; \quad E(u, \Omega) = \iint_{\Omega} d\mu \{ (\varepsilon/2) \|\hat{\nabla}u\|^2 + W(u)/\varepsilon \} \\ \partial_t u(\vec{x}, t) - \varepsilon \hat{\nabla}^2 u(\vec{x}, t) + (1/\varepsilon) \partial_u W(t, u) &= 0 \end{aligned}$$

## 11. CONCLUSIONES

En este trabajo se muestran algunas líneas de investigación analíticas, vinculadas con diversas teorías de conducción del calor y de difusión de materia (especies químicas) en la formulación de gradientes, es decir, cuando en el material existen microestructuras micro o nano.

Se muestran también, diversos acoplamientos a campos elásticos clásicos, y micromórficos en la formulación de A. Madeo-P. Neff.

La idea de la redacción de este trabajo es revisar estas formulaciones a la luz de concepciones fuertemente termodinámicas y su relación con los procesos disipativos (termodinámica lejos del equilibrio) que tiene lugar en cada una de las argumentaciones teóricas exploradas.

## REFERENCIAS

- Aifantis E. Gradient Nanomechanics: Applications to Deformation, Fracture, and Diffusion in Nanopolycrystals. *Metallurgical and Materials Transactions A - physical Metallurgy and Materials Science*, 42, 2011.
- Aifantis E.C. A new interpretation of diffusion in high-diffusivity paths—a continuum approach. *Acta Metallurgica*, 27:683–691, 1979.
- Aifantis E.C. Gradient Deformation Models at Nano, Micro, and Macro Scales. *Journal of Engineering Materials and Technology-transactions of The Asme*, 121:189–202, 1999.
- Aifantis E.C. Update on a class of gradient theories. *Mechanics of Materials*, 35(3):259–280, 2003.
- Aifantis E.C. Internal Length Gradient (ILG) Material Mechanics Across Scales and Disciplines. volumen 49 de *Advances in Applied Mechanics*, páginas 1–110. Elsevier, 2016.
- Casas-Vázquez J. y Jou D. Temperature in non-equilibrium states: A review of open problems and current proposals. *Reports on Progress in Physics - REP PROGR PHYS*, 66, 2003.
- Chandrasekharaiah D.S. Hyperbolic Thermoelasticity: A Review of Recent Literature. *Applied Mechanics Reviews*, 51(12):705–729, 1998.
- Chattopadhyay A.K. y Aifantis E.C. Double diffusivity model under stochastic forcing. *Phys. Rev. E*, 95:052134, 2017.
- Cimmelli V., Sellitto A., y Jou D. Nonequilibrium temperatures, heat waves, and nonlinear heat transport equations. *Phys. Rev. B*, 81, 2010.
- Cimmelli V.A., Jou D., Ruggeri T., y Ván P. Entropy Principle and Recent Results in Non-Equilibrium Theories. *Entropy*, 16(3):1756–1807, 2014.



- Dormieux L., Kondo D., y Ulm F.J. *Microporomechanics*. Wiley, 2006.
- Eringen A.C. Mechanics of Micromorphic Continua. En E. Kröner, editor, *Mechanics of Generalized Continua*, páginas 18–35. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 1968.
- Forest S. y Aifantis E.C. Some links between recent gradient thermo-elasto-plasticity theories and the thermomechanics of generalized continua. *International Journal of Solids and Structures*, 47(25):3367–3376, 2010.
- Guo Z.Y. y Hou Q. Thermal wave based on the thermomass model. *Journal of Heat Transfer*, 132:072403, 2010.
- Guyer R.A. y Krumhansl J.A. Solution of the Linearized Phonon Boltzmann Equation. *Phys. Rev.*, 148:766–778, 1966.
- Jou D. Relationships between rational extended thermodynamics and extended irreversible thermodynamics. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 378(2170):20190172, 2020.
- Jou D. y Cimmelli V. Constitutive equations for heat conduction in nanosystems and nonequilibrium processes: an overview. *Communications in Applied and Industrial Mathematics*, 7, 2016.
- Khurana A., Bala S., Khan H., Tomar S., y Neff P. On the dispersion of waves for the linear thermoelastic relaxed micromorphic model. *Journal of Thermal Stresses*, 43, 2018.
- Lebon G. Heat conduction at micro and nanoscales: A review through the prism of extended irreversible thermodynamics. *J. Non-Equilib. Thermodyn.*, 39:35, 2014.
- Liu W., Saanouni K., Forest S., y Hu P. The Micromorphic Approach to Generalized Heat Equations. *Journal of Non Equilibrium Thermodynamics*, 42:327–357, 2017.
- Mielke A. Thermomechanical modeling of energy-reaction-diffusion systems, including bulk-interface interactions. *Discrete and Continuous Dynamical Systems. Series S*, 2(6), 2013.
- Neff P., Ghiba I.D., Madeo A., Placidi L., y Rosi G. A unifying perspective: The relaxed linear micromorphic continuum. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, 2013.
- Nika G. A gradient system for a higher-gradient generalization of Fourier's law of heat conduction. *Modern Physics Letters B*, 37(11):2350011, 2023.
- Rogolino P., Kovács R., Ván P., y Cimmelli V. Generalized heat-transport equations: Parabolic and hyperbolic models. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, 30, 2018.
- Sellitto A., Cimmelli V.A., y Jou D. *Mesoscopic Theories of Heat Transport in Nanosystems*. SEMA SIMAI Springer Series. Springer International Publishing, 2016.
- Straughan B. *Heat Waves*. Springer New York, 2011.
- Tzou D. Nonlocal behavior in phonon transport. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 54(1):475–481, 2011.
- Tzou D.Y. *Macro- to Microscale Heat Transfer: The Lagging Behavior*. Wiley, United Kingdom, 2014.