

Термодинамический метод получения определяющих уравнений для моделей сплошных сред

Рассматривается термодинамический метод вывода определяющих соотношений для моделей сплошных сред, основанный на неравенстве для свободной энергии и концепции параметров состояния. Описывается модификация этого метода, не требующая привлечения экстремальных принципов для скорости диссипации и разрешающая более широкий класс определяющих соотношений. Применение метода продемонстрировано на ряде примеров вывода определяющих соотношений для известных моделей газообразных, жидких и твердых деформируемых сред.

1. Главным мотивом для построения новых определяющих соотношений является желание теоретически воспроизвести результаты физических экспериментов, которые не описываются вообще или описываются, но не достаточно хорошо имеющимися соотношениями. Новые соотношения должны быть в согласии с имеющимися в области параметров, где существующие соотношения дают хорошие результаты. Наконец, новые соотношения должны быть физически и математически корректны. Это означает, что они должны удовлетворять фундаментальным законам термодинамики, теории размерности, принципам инвариантности и объективности.

Математически и физически ясный подход к построению определяющих соотношений основан на концепции параметров состояния и термодинамическом неравенстве для свободной энергии [1-14]. Ввиду того, что число опубликованных работ, в которых данный подход развивался очень велико и дать здесь ссылки на все работы невозможно, ссылки даны только на те работы, которые непосредственно способствовали выработке предлагаемого метода. В цитированных работах имеются дополнительные ссылки.

Хотя рассматриваемый подход развит во множестве исследований, начиная с пятидесятых годов 20 века и уже может считаться традиционным, имеет смысл воспроизвести основные его положения здесь. Дело в том, что в литературе отсутствует

последовательное изложение этого подхода. Предлагаемая схема термодинамического вывода определяющих соотношений собрана путем анализа большого числа работ, чтобы найти общее, присущее этой схеме и устранить имеющиеся противоречия и пробелы. Как нам представляется, последовательное применение этого подхода позволяет прояснить физические и математические основы как уже известных, так и новых определяющих соотношений.

Термодинамический анализ показывает, что реологические свойства сплошной среды определяются набором внутренних параметров состояния бесконечно малого объема среды и зависимостью функций свободной энергии и скорости диссипации от этих параметров. Определяющие соотношения для энтропии, напряжений и тепловых потоков, а также кинетические уравнения для структурных параметров состояния являются при этом следствиями.

Для примера рассмотрен единообразный вывод известных соотношений для идеального и вязкого теплопроводного газа, для упругой, упругопластической и упруговязкопластической сред. После этого построены соотношения для описания процессов разрушения упруговязкопластических сред и геоматериалов.

2. Напомним вкратце необходимые для изложения определения и связи между материальными и пространственными тензорами, характеризующими состояние элементарного объема сплошной среды. Пространственные тензора деформации $\boldsymbol{\varepsilon}$ (тензор Альманси) и скорости деформации \boldsymbol{e} (тензор Эйлера) определяются следующими соотношениями

$$\begin{aligned} d\mathbf{x} &= \mathbf{F} \cdot d\mathbf{x}^0, & d\mathbf{x} \cdot d\mathbf{x} - d\mathbf{x}^0 \cdot d\mathbf{x}^0 &= d\mathbf{x} \cdot 2\boldsymbol{\varepsilon} \cdot d\mathbf{x} \\ \frac{d}{dt}(d\mathbf{x}) &= \mathbf{L} \cdot d\mathbf{x}, & \frac{d}{dt}(d\mathbf{x} \cdot d\mathbf{x}) &= d\mathbf{x} \cdot 2\boldsymbol{e} \cdot d\mathbf{x} \end{aligned} \quad (2.1)$$

где \mathbf{F} - тензор градиента деформации и \mathbf{L} - тензор градиентов скоростей. Соотношения между \mathbf{F} , $\boldsymbol{\varepsilon}$, \mathbf{L} и \boldsymbol{e} могут быть получены из (2.1)

$$\begin{aligned} \mathbf{L} &= \frac{d\mathbf{F}}{dt} \cdot \mathbf{F}^{-1}, & \boldsymbol{\varepsilon} &= \frac{1}{2}(\mathbf{I} - \mathbf{F}^{-T} \cdot \mathbf{F}^{-1}) \\ \boldsymbol{e} &= \frac{1}{2}(\mathbf{L} + \mathbf{L}^T), & \boldsymbol{e} &= \frac{d\boldsymbol{\varepsilon}}{dt} + \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{L} + \mathbf{L}^T \cdot \boldsymbol{\varepsilon} \end{aligned} \quad (2.2)$$

где \mathbf{I} - тензорная единица.

Плотность ρ , пространственный тензор напряжений Коши $\boldsymbol{\sigma}$ и пространственный вектор диффузионного потока тепла \mathbf{q} определяются следующими соотношениями

$$dm = \rho dV, \quad d\mathbf{P} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} dS, \quad dQ = \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} dS \quad (2.3)$$

где dm - масса бесконечно малого объема dV в текущей конфигурации, $d\mathbf{P}$ - сила, действующая на бесконечно малой площадке dS с единичной нормалью \mathbf{n} , dQ - количество тепла диффундировавшего через площадку dS в единицу времени. Плотность подчинена закону сохранения массы (уравнению неразрывности)

$$\frac{d\rho}{dt} + \rho \mathbf{e} : \mathbf{I} = 0 \quad \text{или} \quad \frac{\rho}{\rho_0} = \det(\mathbf{F}^{-1}) \quad (2.4)$$

где ρ_0 - начальная плотность.

Материальные тензоры деформаций $\overset{0}{\boldsymbol{\varepsilon}}$, скоростей деформаций $\overset{0}{\mathbf{e}}$ и напряжений $\overset{0}{\boldsymbol{\sigma}}$ определяются так

$$d\mathbf{x} \cdot d\mathbf{x} - d\overset{0}{\mathbf{x}} \cdot d\overset{0}{\mathbf{x}} = d\overset{0}{\mathbf{x}} \cdot \overset{0}{\boldsymbol{\varepsilon}} \cdot d\overset{0}{\mathbf{x}}, \quad \frac{d}{dt}(d\mathbf{x} \cdot d\mathbf{x}) = d\overset{0}{\mathbf{x}} \cdot \overset{0}{\mathbf{e}} \cdot d\overset{0}{\mathbf{x}}, \quad \overset{0}{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \overset{0}{\mathbf{e}} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{e}$$

и связаны с соответствующими пространственными тензорами $\boldsymbol{\varepsilon}$, \mathbf{e} , $\boldsymbol{\sigma}$ следующими соотношениями

$$\overset{0}{\boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbf{F}^T \cdot \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{F}, \quad \overset{0}{\mathbf{e}} = \mathbf{F}^T \cdot \mathbf{e} \cdot \mathbf{F}, \quad \overset{0}{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{F}^{-1} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{F}^{-T}, \quad \frac{d\overset{0}{\boldsymbol{\varepsilon}}}{dt} = \overset{0}{\mathbf{e}} \quad (2.5)$$

3. Рассмотрим термодинамические основы предлагаемого метода. Общие законы термодинамики неравновесных необратимых термомеханических процессов имеют вид

$$\rho \frac{dU}{dt} = \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{e} + \rho r + \nabla \cdot \mathbf{q}$$

$$\rho T \frac{d\eta}{dt} - T \nabla \cdot \left(\frac{\mathbf{q}}{T} \right) - \rho r \geq 0$$

где внутренняя энергия U , внешние источники тепла r и энтропия η отнесены к единице массы; T - температура, $\boldsymbol{\sigma}$ - тензор напряжений

Коши, \mathbf{e} - Эйлеров тензор скоростей деформаций и \mathbf{q} - тепловой поток. Здесь первое уравнение дает математическую формулировку закона сохранения энергии, второе соотношение выражает закон возрастания энтропии. Следствием законов термодинамики является неравенство для свободной энергии $\phi = U - T\eta$

$$-\rho \frac{d\phi}{dt} - \rho\eta \frac{dT}{dt} + \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{e} + \frac{1}{T} \mathbf{q} \cdot \nabla T \geq 0 \quad (3.1)$$

Это неравенство не содержит внешних переменных (таких как источники тепла) и оно должно выполняться для любого термомеханического процесса. Следовательно, свободную энергию можно рассматривать как функцию состояния, определяемого набором параметров состояния.

При выводе определяющих соотношений будем использовать материальные тензоры наряду с пространственными для упрощения выкладок, поскольку для материальных тензоров скорости их изменения во времени определяются обычными материальными временными производными, в то время как для пространственных тензоров пришлось бы учитывать вращение и деформации элементарного объема сплошной среды (см. формулы (2.2) и (2.5)), что внесло бы ненужные осложнения.

Выбор параметров состояния определяет класс рассматриваемых сплошных сред. В общем случае число параметров состояния может быть бесконечным, например в случае вязко-упругих сред интегрального типа (термодинамика таких сред рассмотрена подробно в [6]). Предлагаемая схема термодинамического вывода определяющих соотношений для ясности изложена для более простого случая сред с конечным числом параметров состояния.

Рассмотрим следующий набор независимых параметров состояния

$$\pi = (T, \boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\chi}, \frac{dT}{dt}, \mathbf{e}, \frac{d\boldsymbol{\chi}}{dt}, \nabla T) \quad (3.2)$$

где $\boldsymbol{\chi}$ - параметры состояния, отвечающие за процессы перестройки внутренней структуры среды такие как пластическое течение, разрушение или спекание. Эти параметры не фигурируют явно в неравенстве свободной энергии и вводятся для учета влияния истории нагружения. Эти параметры определяются дифференциальными по времени (кинетическими) уравнениями,

рассматриваемыми далее, а соответствующие сплошные среды называются средами дифференциального типа.

В дальнейшем будем предполагать, что набор параметров π минимален и полон. Это означает, что скорости изменения параметров (3.2) во времени взаимно независимы и что все остальные внутренние переменные (энтропия, напряжения, тепловые потоки и т.д.) являются функциями этих параметров, что, в частности, относится и к свободной энергии

$$\varphi = \varphi(\pi), \quad \sigma = \sigma(\pi), \quad \eta = \eta(\pi), \quad \mathbf{q} = \mathbf{q}(\pi) \quad (3.3)$$

Используя (3.2-3.3), можно переписать неравенство (3.1)

$$\begin{aligned} & -\rho \left(\eta + \frac{\partial \varphi}{\partial T} \right) \frac{dT}{dt} + \left(\overset{0}{\sigma} - \rho \frac{\partial \varphi}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} \right) : \overset{0}{\mathbf{e}} - \rho \frac{\partial \varphi}{\partial \boldsymbol{\chi}} : \frac{d \overset{0}{\boldsymbol{\chi}}}{dt} + \frac{1}{T} \mathbf{q} \cdot \nabla T - \\ & - \rho \frac{\partial \varphi}{\partial T_t} : \frac{dT_t}{dt} - \rho \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{e}} : \frac{d \overset{0}{\mathbf{e}}}{dt} - \rho \frac{\partial \varphi}{\partial \boldsymbol{\chi}_t} : \frac{d \overset{0}{\boldsymbol{\chi}_t}}{dt} - \rho \frac{\partial \varphi}{\partial \nabla T} : \frac{d \nabla T}{dt} \geq 0 \end{aligned}$$

Производные $\frac{dT_t}{dt}$, $\frac{d \overset{0}{\mathbf{e}}}{dt}$, $\frac{d \overset{0}{\boldsymbol{\chi}_t}}{dt}$, $\frac{d \nabla T}{dt}$ не принадлежат набору параметров состояния (3.2), в то время как множители при этих производных являются исключительно функциями параметров состояния (3.2), поэтому присутствие содержащих эти производные членов неизбежно нарушает неравенство (3.3) и законы термодинамики. Отсюда следует, что их быть не должно

$$\frac{\partial \varphi}{\partial T_t} = 0, \quad \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{e}} = 0, \quad \frac{\partial \varphi}{\partial \boldsymbol{\chi}_t} = 0, \quad \frac{\partial \varphi}{\partial \nabla T} = 0,$$

и функция свободной энергии зависит только от части набора параметров состояния $\pi^{(1)}$

$$\varphi = \varphi(\pi^{(1)}), \quad \pi^{(1)} = (T, \boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\chi})$$

Теперь неравенство (3.1) принимает форму неравенства диссипации

$$-\rho \left(\eta + \frac{\partial \varphi}{\partial T} \right) \frac{dT}{dt} + \left(\overset{0}{\sigma} - \rho \frac{\partial \varphi}{\partial \varepsilon} \right) : \overset{0}{e} - \rho \frac{\partial \varphi}{\partial \chi} : \frac{d\overset{0}{\chi}}{dt} + \frac{1}{T} \mathbf{q} \cdot \nabla T \geq 0 \quad (3.4)$$

где четыре группы слагаемых представляют основные диссипативные процессы: необратимый рост энтропии, диффузию импульса, структурную перестройку сплошной среды и диффузию тепла.

Общим решением неравенства диссипации являются искомые определяющие соотношения

$$\begin{aligned} -\rho \left(\eta + \frac{\partial \varphi}{\partial T} \right) &= -\rho \eta_D \left(T, \varepsilon, \chi, \left[\frac{dT}{dt} \right], \overset{0}{e}, \frac{d\overset{0}{\chi}}{dt}, \nabla T \right) \\ \overset{0}{\sigma} - \rho \frac{\partial \varphi}{\partial \varepsilon} &= \overset{0}{\sigma}_D \left(T, \varepsilon, \chi, \frac{dT}{dt}, \left[\overset{0}{e} \right], \frac{d\overset{0}{\chi}}{dt}, \nabla T \right) \\ -\rho \frac{\partial \varphi}{\partial \chi} &= \rho \overset{0}{\mathbf{X}}_D \left(T, \varepsilon, \chi, \frac{dT}{dt}, \overset{0}{e}, \left[\frac{d\overset{0}{\chi}}{dt} \right], \nabla T \right) \\ \frac{\mathbf{q}}{T} &= \frac{1}{T} \mathbf{q}_D \left(T, \varepsilon, \chi, \frac{dT}{dt}, \overset{0}{e}, \frac{d\overset{0}{\chi}}{dt}, [\nabla T] \right) \end{aligned} \quad (3.5)$$

где квадратные скобки при некоторых аргументах не означают каких-либо математических действий и поясняются далее. Функции $Z_1 = -\rho \eta_D$, $Z_2 = \overset{0}{\sigma}_D$, $Z_3 = \rho \overset{0}{\mathbf{X}}_D$, $Z_4 = \frac{1}{T} \mathbf{q}_D$ называются диссипативными потоками или диссипативными силами и должны обеспечивать выполнение неравенства скорости диссипации, которое принимает следующий вид

$$D = -\rho \eta_D(\dots) \frac{dT}{dt} + \overset{0}{\sigma}_D(\dots) : \overset{0}{e} + \rho \overset{0}{\mathbf{X}}_D(\dots) : \frac{d\overset{0}{\chi}}{dt} + \frac{1}{T} \mathbf{q}_D(\dots) \cdot \nabla T \geq 0 \quad (3.6)$$

В частном случае обратимых процессов функции $\eta_D(\pi)$, $\overset{0}{\sigma}_D(\pi)$, $\mathbf{q}_D(\pi)$, $\overset{0}{\mathbf{X}}_D(\pi)$ обращаются в нуль и неравенство (3.6) становится равенством. Таким образом, для получения определяющих

соотношений необходимо конкретизировать набор параметров состояния и построить две функции: функцию свободной энергии ϕ и функцию скорости диссипации D , руководствуясь при этом физическими представлениями о свойствах рассматриваемой среды.

Диссипативные потоки или "силы" $Z_i: -\rho\eta_D, \overset{0}{\sigma}_D, \rho\overset{0}{X}_D, \mathbf{q}_D(\dots)/T$ строятся одновременно и согласованно с функцией скорости диссипации так, чтобы удовлетворить неравенству скорости диссипации. Тем самым задача построения определяющих соотношений замыкается. Для выполнения требований принципов инвариантности и объективности достаточно убедиться, что выражения функций свободной энергии и скорости диссипации не зависят от ортогональных преобразований начальной и текущей (актуальной) конфигураций и от выбора инерциальной системы отсчета. Эти требования заведомо будут выполнены, если функции $\phi(\pi^{(1)})$ и $D(\pi^{(1)}, \pi^{(2)})$ зависят только от тензорных инвариантов определяющих параметров, удовлетворяющих этим требованиям.

Можно искать решения неравенства скорости диссипации и в более узких классах функций, описывающих основные диссипативные процессы. Например, можно потребовать, чтобы каждая из составляющих скорости диссипации $D_i = Z_i \pi_i^{(2)}$ была бы однородной функцией соответствующей обобщенной скорости $\pi_i^{(2)}$, где

$$\pi^{(2)} = \left(\frac{dT}{dt}, \mathbf{e}, \frac{d\chi}{dt}, \nabla T \right), \quad Z = (-\rho\eta_D, \overset{0}{\sigma}_D, \rho\overset{0}{X}_D, \mathbf{q}_D/T)$$

В общих определяющих соотношениях (3.5) аргументы, по которым функция однородна, выделены квадратными скобками. Тогда в соответствии с теоремой Эйлера об однородных функциях выражения для диссипативных потоков принимают следующий вид

$$Z_i = \kappa_i \frac{\partial D_i}{\partial \pi_i^{(2)}}, \quad \kappa_i = \frac{D_i}{\frac{\partial D_i}{\partial \pi_i^{(2)}} : \pi_i^{(2)}} \quad (3.7)$$

где κ_i^{-1} - показатели однородности функций D_i . Этот же частный класс решений выделяется экстремальным принципом для скорости диссипации Циглера [9] и теорией Онзагера [3].

Общие определяющие соотношения (3.5) оставляют большой простор для построения моделей сплошных сред и могут быть

использованы более широко для обоснования моделей, построенных эмпирически и/или на основе представлений микромеханики и физики сплошных сред.

4. Покажем на характерных примерах известных моделей сплошных сред как описанная выше схема позволяет выводить определяющие соотношения. Для получения определяющих соотношений надо: 1) указать процессы, которые существенны для данной среды и ввести соответствующие параметры состояния (3.2), 2) построить выражения для свободной энергии и скорости диссипации, и 3) воспользоваться формулами (3.5).

Процедура построения определяющих соотношений, как можно усмотреть в разбираемых ниже примерах, сильно напоминает игру: что заложишь, то и получишь. Описанная схема устанавливает правила такой игры, которые ограничивают полет фантазии и гарантируют результат, находящийся в согласии с основными законами и принципами термомеханики.

Перед рассмотрением примеров сделаем несколько существенных замечаний. Отметим, что плотность не является независимым параметром состояния, так как скорость ее изменения определяется скоростью изменения тензора деформаций в соответствии с уравнением неразрывности (3.2).

Подчеркнем особо необходимость перехода к материальным мерам тензорных параметров при проведении выкладок. Такой переход необременителен и, упрощая выкладки, избавляет от кучи возможных ошибок. Обратный переход к пространственным тензорам можно сделать после вывода определяющих соотношений. Заметим, что пространственные тензоры часто оказываются более удобными для решения задач взаимодействия сред различной природы (задачи аэрогидромеханики, аэроупругости, высокоскоростного удара твердых деформируемых тел, взрыва и т.п.).

При математических операциях с определяющими соотношениями принятая здесь абстрактная тензорная нотация (см. например [13]) также более удобна и позволяет избежать многих недоразумений, случающихся порой, если рассуждения проводятся с компонентами тензоров относительно систем базисных векторов, отнесенных к различным конфигурациям. Внешне соотношения, выписанные в компонентах тензоров, могут выглядеть так же как приводимые здесь абстрактные тензорные соотношения, однако в зависимости от используемого векторного базиса они могут выражать совершенно другие закономерности. Поэтому сравнение определяющих соотношений надо проводить в условиях какой-либо одной и той же системы записи.

4.1. Рассмотрим модель вязкой теплопроводной среды Навье-Стокса. Она может быть определена как среда, которая накапливает тепло (свободная энергия зависит от температуры), сопротивляется объемному сжатию (свободная энергия зависит от плотности), не помнит начального состояния (нет зависимости от начальной плотности) и обладает свойством диффузии количества движения и тепла (скорость диссипации зависит от скорости деформации и градиента температуры). В первом приближении сказанное можно записать так

$$\varphi = \varphi_1(\rho, T),$$

$$D = \lambda_v (\mathbf{e} : \mathbf{I})^2 + 2\mu_v \mathbf{e} : \mathbf{e} + \frac{k_q}{T} \nabla T \cdot \nabla T$$

где \mathbf{I} - единичный тензор, λ_v , μ_v - коэффициенты вязкости, k_q - коэффициент теплопроводности. Заметим, что скорость диссипации записана с использованием инвариантов пространственных тензоров скорости деформации. Если перейти к материальным тензорам, формула для скорости диссипации примет вид

$$D = (\lambda_v (\mathbf{F}^{-1} \cdot \mathbf{F}^{-T} : \overset{\circ}{\mathbf{e}}) \mathbf{F}^{-1} \cdot \mathbf{F}^{-T} + 2\mu_v \mathbf{F}^{-1} \cdot \mathbf{F}^{-T} \cdot \overset{\circ}{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{F}^{-1} \cdot \mathbf{F}^{-T}) : \overset{\circ}{\mathbf{e}} + \frac{k_q}{T} \nabla T \cdot \nabla T$$

Аналогичный переход к материальным тензорам делается и далее, но после выкладок окончательный результат записывается опять с использованием пространственных тензоров. Промежуточные выкладки опускаются.

Определяющие соотношения для сжимаемого вязкого газа получаются в обычном виде, не зависящем от начальной конфигурации сплошной среды

$$\eta = \eta_c = -\frac{\partial \varphi_1}{\partial T}, \quad \boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}_c + \boldsymbol{\sigma}_D, \quad \boldsymbol{\sigma}_c = -p \mathbf{I}, \quad p = \rho^2 \frac{\partial \varphi_1}{\partial \rho},$$

$$\boldsymbol{\sigma}_D = \lambda_v (\mathbf{e} : \mathbf{I}) \mathbf{I} + 2\mu_v \mathbf{e}, \quad \mathbf{q} = k_q \nabla T, \quad U = U_c = \varphi_1 - T \frac{\partial \varphi_1}{\partial T}$$

Индекс "С" выделяет консервативные составляющие, которые определяются свободной энергией, индекс "D" выделяет диссипативные составляющие, которые определяются скоростью диссипации. В частном случае идеального газа для свободной энергии имеем

$$\varphi_1(T, \rho) = C_v T \left((\gamma - 1) \ln \frac{\rho}{\rho_1} - \ln \frac{T}{T_1} \right)$$

где C_v - теплоемкость при постоянном объеме, γ - отношение теплоемкостей, ρ_1 и T_1 произвольные фиксированные значения плотности и температуры. Соотношения для энтропии, давления и внутренней энергии имеют известный вид

$$\eta = \eta_c = C_v \left(1 - (\gamma - 1) \ln \frac{\rho}{\rho_1} + \ln \frac{T}{T_1} \right), \quad p = (\gamma - 1) \rho U, \quad U = C_v T$$

В частном случае несжимаемой среды свободная энергия не зависит от плотности и давление определяется условием несжимаемости.

4.2. Рассмотрим нелинейную термоупругую изотропную теплопроводную среду. Она может быть определена как среда, которая накапливает тепло и помнит начальное недеформированное состояние (свободная энергия зависит от температуры и деформации и ее минимум по деформациям достигается в недеформированном состоянии при нулевом значении деформации), а также рассеивает тепло (скорость диссипации зависит от градиента температуры). Для термоупругой среды с большими объемными и малыми сдвиговыми деформациями в первом приближении могут быть построены следующие выражения для свободной энергии и скорости диссипации

$$\varphi = \varphi_1(T, \rho) + h_1 \frac{\mu(T, \rho)}{\rho} \boldsymbol{\varepsilon}' : \boldsymbol{\varepsilon}'$$

$$D = \frac{k_q}{T} \nabla T \cdot \nabla T$$

где $\boldsymbol{\varepsilon}' = \boldsymbol{\varepsilon} - (\boldsymbol{\varepsilon} : \mathbf{I}) \mathbf{I} / 3$ - девиатор деформаций, $\mu = \mu(T, \rho)$ - модуль упругости сдвига и $h_1 = \left(1 - \frac{2}{3} (\boldsymbol{\varepsilon} : \mathbf{I}) \right)^{-1}$.

Определяющие соотношения имеют вид

$$\eta = \eta_c = - \frac{\partial \varphi_1}{\partial T} - h_1 (\boldsymbol{\varepsilon}' : \boldsymbol{\varepsilon}') \frac{1}{\rho} \frac{\partial \mu}{\partial T}$$

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}_c = -p \mathbf{I} + 2\mu \boldsymbol{\varepsilon}', \quad p = \rho^2 \frac{\partial \varphi_1}{\partial \rho}, \quad \mathbf{q} = k_q \nabla T$$

$$U = U_c = \varphi - T \frac{\partial \varphi}{\partial T} = \varphi_1(T, \rho) - T \frac{\partial \varphi_1}{\partial T} + \frac{h_1}{\rho} \left(\mu(T, \rho) - T \frac{\partial \mu}{\partial T} \right) \boldsymbol{\varepsilon}' : \boldsymbol{\varepsilon}'$$

В частном случае, если функция $\varphi_1(T, \rho)$ имеет вид:

$$\varphi_1(T, \rho) = \frac{K}{2\rho_0} \left(\ln \frac{\rho}{\rho_0} \right)^2$$

тогда для давления получается простое выражение:

$$p = K \frac{\rho}{\rho_0} \ln \frac{\rho}{\rho_0}$$

где K - объемный модуль упругости.

4.3. Перейдем к анализу сред со структурными параметрами состояния. Сначала рассмотрим пример термоупруговязко-пластической среды. Так же как упругая среда она накапливает тепло (свободная энергия зависит от температуры), энергию деформации (свободная энергия зависит от деформации), но ее разгруженное состояние (минимум свободной энергии по деформациям) отвечает ненулевой деформации $\varepsilon = \varepsilon_p$, которая называется пластической. Тензор пластических деформаций ε_p характеризует структурную перестройку сплошной среды благодаря появлению, росту и движению дислокаций. Он является одним из внутренних структурных параметров состояния χ , не связан с каким-либо полем перемещений и не удовлетворяет условиям совместности деформаций. Поэтому никакой кинематики пластических деформаций не существует. Понятие "разгруженная конфигурация" имеет смысл только локально в применении к окрестности материальной точки [15]. Тензор пластической деформации определяется специальным кинетическим уравнением, называемым законом пластического течения, термодинамический вывод которого приводится ниже.

Таким образом для упруговязкопластической среды свободная энергия является функцией температуры, деформации и пластической деформации. При этом тензор пластической деформации указывает точку в пространстве деформаций, где свободная энергия имеет локальный минимум по деформациям. Скорость диссипации зависит от скорости пластической деформации (необратимые изменения структуры среды) и от градиента температуры (рассеяние тепла).

Материальный тензор скоростей пластических деформаций вводится как материальная производная от материального тензора пластических деформаций

$$\mathbf{e}_p^0 = \frac{d\boldsymbol{\varepsilon}_p^0}{dt}$$

Соответствующие пространственные тензоры удобно ввести также, как для обычных тензоров деформации и скорости деформации (см. (2.5))

$$\boldsymbol{\varepsilon}_p = \mathbf{F}^{-T} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_p^0 \cdot \mathbf{F}^{-1}, \quad \mathbf{e}_p = \mathbf{F}^{-T} \cdot \mathbf{e}_p^0 \cdot \mathbf{F}^{-1}, \quad \mathbf{e}_p = \frac{d\boldsymbol{\varepsilon}_p}{dt} + \boldsymbol{\varepsilon}_p \cdot \mathbf{L} + \mathbf{L}^T \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_p$$

Тензор $\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_p$ характеризует отклонение деформированного состояния среды от разгруженного и называется тензором упругой деформации. Для пластически несжимаемой среды с большими объемными упругими и малыми сдвиговыми упругими деформациями выражения для свободной энергии и скорости диссипации могут быть представлены в следующем виде

$$\begin{aligned} \varphi &= \varphi_1(T, \rho) + h_1 \frac{\mu}{\rho} \left((\boldsymbol{\varepsilon}' - \boldsymbol{\varepsilon}'_p) : (\boldsymbol{\varepsilon}' - \boldsymbol{\varepsilon}'_p) \right) \\ D &= H \left(\boldsymbol{\sigma}' : \boldsymbol{\sigma}' - \frac{k_p^2 f_p^2}{\mathbf{e}' : \mathbf{e}'} \right) k_p f_p (\mathbf{e}' : \mathbf{e}') + \frac{k_q}{T} \nabla T \cdot \nabla T \end{aligned}$$

где пластическая деформация представлена ее девиаторной частью $\boldsymbol{\varepsilon}'_p = \boldsymbol{\varepsilon}_p - (\boldsymbol{\varepsilon}_p : \mathbf{I}) \mathbf{I} / 3$, коэффициенты $k_q = k_q(T, \rho, \boldsymbol{\varepsilon}'_p : \boldsymbol{\varepsilon}'_p)$ и $k_p = k_p(T, \rho, \boldsymbol{\varepsilon}'_p : \boldsymbol{\varepsilon}'_p)$ являются экспериментально определяемыми функциями, $H(\xi)$ - функция Хевисайда, равная нулю для отрицательных значений аргумента и единице в противном случае, $f_p = f_p(\mathbf{e}'_p : \mathbf{e}'_p)$ - функция второго инварианта девиатора скоростей пластических деформаций. Все введенные функции неотрицательны. Определяющие соотношения имеют вид:

$$\begin{aligned} \eta &= \eta_c = \frac{\partial \varphi_1}{\partial T} - h_1 \left((\boldsymbol{\varepsilon}' - \boldsymbol{\varepsilon}'_p) : (\boldsymbol{\varepsilon}' - \boldsymbol{\varepsilon}'_p) \right) \frac{1}{\rho} \frac{\partial \mu}{\partial T} \\ \boldsymbol{\sigma} &= \boldsymbol{\sigma}_c = -p \mathbf{I} + 2\mu (\boldsymbol{\varepsilon}' - \boldsymbol{\varepsilon}'_p), \quad p = \rho^2 \frac{\partial \varphi}{\partial \rho} \\ \mathbf{e}'_p &= H \left(\boldsymbol{\sigma}' : \boldsymbol{\sigma}' - \frac{k_p^2 f_p^2}{\mathbf{e}'_p : \mathbf{e}'_p} \right) \left(\frac{k_p f_p}{\mathbf{e}'_p : \mathbf{e}'_p} \right)^{-1} \boldsymbol{\sigma}' \\ U &= U_c = \varphi - T \frac{\partial \varphi}{\partial T} = \varphi_1(T, \rho) - T \frac{\partial \varphi_1}{\partial T} + \frac{h_1}{\rho} \left(\mu(T, \rho) - T \frac{\partial \mu}{\partial T} \right) (\boldsymbol{\varepsilon}' - \boldsymbol{\varepsilon}'_p)^2 : \mathbf{I} \end{aligned}$$

$$\mathbf{q} = k_q \nabla T$$

Условие пластичности является при этом следствием

$$\boldsymbol{\sigma}' : \boldsymbol{\sigma}' = \left(\frac{k_p f_p}{\mathbf{e}'_p : \mathbf{e}'_p} \right)^2 (\mathbf{e}'_p : \mathbf{e}'_p)$$

Случай упруго-пластической среды соответствует однородной функции первого порядка $f_p = (\mathbf{e}'_p : \mathbf{e}'_p)^{\frac{1}{2}}$, при этом условие пластичности не зависит от скорости пластической деформации: $\boldsymbol{\sigma}' : \boldsymbol{\sigma}' = k_p^2$.

5. Рассмотрим модели разрушающихся сред. Разрушение представим как процесс накопления микродефектов, характеризуемый специальным структурным параметром - повреждаемостью θ . Не обсуждая детали возможных физических определений повреждаемости (см. например [16,17]), установим вид определяющих соотношений, подсказываемый законами термодинамики.

5.1. Рассмотрим модификацию модели упруго-вязко-пластической среды. Будем считать, что параметр разрушения растет, если выполнен критерий разрушения

$$\Phi(T, \boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\varepsilon}_p, \theta) \geq 0$$

Известно, что по мере накопления повреждаемости жесткость среды уменьшается и скорости распространения волн в среде также уменьшаются [13]. Поэтому, примем, что модули упругости и предел текучести зависят от параметра разрушения

$$\mu = \mu_0(T)g_\mu(\theta), \quad K = K_0(T)g_K(\theta), \quad k_p = k_{p0}(T)g_p(\theta)$$

где $K_0 = K_0(T)$, $\mu_0 = \mu_0(T)$ - модули упругости, $k_{\sigma 0} = k_{\sigma 0}(T, \boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\varepsilon}_p)$ - предел текучести для неповрежденной сплошной среды. Функции g_μ, g_K, g_σ отражают зависимость этих величин от повреждаемости и имеют следующие свойства:

$$0 < g_\mu, g_K, g_\sigma \leq 1, \quad g_\mu(0) = g_K(0) = g_\sigma(0) = 1$$

$$g_\mu(\infty) = g_K(\infty) = g_\sigma(\infty) = 0, \quad \frac{dg_\mu}{d\theta}, \frac{dg_K}{d\theta}, \frac{dg_\sigma}{d\theta} \leq 0$$

То есть, с ростом повреждаемости сопротивляемость среды падает.

Простые выражения для свободной энергии и скорости диссипации имеют вид

$$\varphi = \frac{K}{2\rho_0} \left(\ln \frac{\rho}{\rho_0} \right)^2 + \frac{\mu}{2\rho} (\boldsymbol{\varepsilon}' - \boldsymbol{\varepsilon}'_p)^2 : \mathbf{I}$$

$$D = H(\boldsymbol{\sigma}' : \boldsymbol{\sigma}' - k_p^2) k_p (\mathbf{e}' : \mathbf{e}')^{1/2} + \frac{k_q}{T} \nabla T \cdot \nabla T + H(\Phi) k_\theta \left(\frac{d\theta}{dt} \right)^2$$

где k_q и k_θ - неотрицательные функции от $T, \varepsilon, \varepsilon_p, \theta$. Используя общие соотношения (3.5) и пренебрегая членами высших порядков малости, приходим к следующим определяющим соотношениям

$$\eta = -\frac{\partial \varphi}{\partial T}, \quad \boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + \boldsymbol{\sigma}', \quad p = K \frac{\rho}{\rho_0} \ln \frac{\rho}{\rho_0}, \quad \boldsymbol{\sigma}' = 2\mu (\boldsymbol{\varepsilon}' - \boldsymbol{\varepsilon}'_p)$$

$$\mathbf{e}'_p = H(\boldsymbol{\sigma}' : \boldsymbol{\sigma}' - k_p^2) \left(\frac{k_p}{(\mathbf{e}'_p : \mathbf{e}'_p)^{1/2}} \right)^{-1} \boldsymbol{\sigma}'$$

$$\mathbf{q} = k_q \nabla T, \quad U = \varphi - T \frac{\partial \varphi}{\partial T}, \quad \frac{d\theta}{dt} = -H(\Phi) k_\theta^{-1}(T, \varepsilon, \varepsilon_p, \theta) \frac{\partial \varphi}{\partial \theta}$$

Эти соотношения были использованы для численного моделирования процессов разрушения и локализации деформаций в работе [17].

5.2. Теперь дадим термодинамический вывод другой модели разрушения, предложенной в [16] для описания поведения геоматериалов. В соответствии с опытными данными для большинства изотропных геоматериалов при построении этой модели полагается, что свободная энергия с достаточной степенью точности может быть представлена в виде квадратичной формы от тензора упругих деформаций (разности между тензором деформаций и тензором пластических деформаций) с коэффициентами, зависящими от повреждаемости. В выражении для скорости диссипации учитывается тот факт, что геоматериалы являются пластически сжимаемыми, то есть учитывается зависимость от шаровой части тензора пластических деформаций.

Свободная энергия и скорость диссипации, приводящие к определяющим соотношениям модели разрушения [16], записываются в виде

$$\varphi = \frac{K(T, \theta)}{2\rho} ((\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_p) : \mathbf{I})^2 + \frac{\mu(T, \theta)}{\rho} (\boldsymbol{\varepsilon}' - \boldsymbol{\varepsilon}'_p)^2 : \mathbf{I}$$

$$D = \frac{K}{\Lambda\Theta} (\mathbf{e}_p : \mathbf{I})^2 + 2\mu\tau \mathbf{e}'_p : \mathbf{e}'_p + \frac{Q}{\Theta} \left(\frac{d\theta}{dt} \right)^2 + \frac{k_q}{T} \nabla T \cdot \nabla T$$

где

$$Q = - \left(\frac{1}{2} \frac{\partial K}{\partial \theta} ((\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_p) : \mathbf{I})^2 + \frac{\partial \mu}{\partial \theta} (\boldsymbol{\varepsilon}' - \boldsymbol{\varepsilon}'_p)^2 : \mathbf{I} \right)$$

и введены следующие функции, зависящие от тензора упругих деформаций, повреждаемости и температуры: τ - время релаксации, $\Theta \geq 0$ - скорость накопления повреждаемости, $\Lambda \geq 0$ - скорость дилатансии, k_q - коэффициент теплопроводности. Определяющие уравнения имеют вид

$$\eta = - \frac{\partial \phi}{\partial T}, \quad \boldsymbol{\sigma} = K\mathbf{I} : (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_p)\mathbf{I} + 2\mu(\boldsymbol{\varepsilon}' - \boldsymbol{\varepsilon}'_p)$$

$$\mathbf{e}'_p = \frac{\boldsymbol{\sigma}'}{2\mu\tau}, \quad \mathbf{e}_p : \mathbf{I} = \Lambda\Theta \frac{\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{I}}{K}$$

$$\frac{d\theta}{dt} = \Theta(T, \boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_p, \theta), \quad \mathbf{q} = k_q \nabla T, \quad U = \phi - T \frac{\partial \phi}{\partial T}$$

Эти определяющие уравнения были использованы для численного моделирования процессов локализации и разрушения при динамических и квазистатических нагрузках [16-18].

6. Покажем как можно видоизменить модели разрушающегося пористого материала, чтобы она учитывала также процессы спекания (консолидации) сплошной среды. Для этого удобно ввести зависимый от пластической деформации структурный параметр - пористость ω . Плотность пор определяется как отношение объема, занятого порами к полному объему занятому сплошной средой. Остаточная плотность среды ρ_p отвечает разгруженному состоянию, то есть состоянию с нулевым уровнем консервативных напряжений и может быть вычислена как с помощью пористости ω , так и с помощью пластической деформации:

$$\rho_p = \rho_{\max}(1 - \omega), \quad \frac{d\rho_p}{dt} = -\rho_p (\mathbf{e}_p : \mathbf{I})$$

Отсюда следует соотношение между пористостью и объемной пластической деформацией

$$\mathbf{e}_p : \mathbf{I} = \frac{1}{1-\omega} \frac{d\omega}{dt}$$

Из определения пористости следует, что $0 \leq \omega \leq \omega_{\max} < 1$, где ω_{\max} - максимально возможная величина пористости сплошной среды, при достижении которой среда распадается на отдельные материальные частицы. Равенство $\omega = \omega_{\max}$ имеет место, например в случае начального состояния композитной среды, представленного порошком из нескольких компонентов, засыпанным в форму-контейнер. Величина ω_{\max} может быть легко подсчитана через плотности компонентов, их процентное содержание и начальный объем. В случае, если поры ограничены жидкими (расплавленными) компонентами композита, на поверхности пор действуют поверхностные капиллярные силы. Поры, на поверхности которых действуют капиллярные силы, называются активными и могут вызывать эффект уплотнения среды (спекания). Для описания этого эффекта свободная энергия активных пор должна быть учтена как часть свободной энергии сплошной среды $\varphi_{\omega}(T, \omega)$.

Модифицированные таким образом модели раздела 5 приводят к таким функциям свободной энергии и скорости диссипации

$$\varphi = \frac{K}{\rho_0} \left(\ln \frac{\rho}{\rho_p} \right)^2 + \frac{\mu}{\rho} (\boldsymbol{\varepsilon}' - \boldsymbol{\varepsilon}'_p)^2 : \mathbf{I} + H(T - T_m) \varphi_{\omega}(T - T_m, \omega)$$

$$D = \lambda_p^{-1} (\mathbf{e}'_p : \mathbf{e}'_p)^2 + \frac{k_q}{T} \nabla T \cdot \nabla T + H(\omega) \lambda_{\omega}^{-1} \left(\frac{d\omega}{dt} \right)^2 + H(\Phi) \lambda_{\theta}^{-1} \left(\frac{d\theta}{dt} \right)^2$$

где λ_p , k_q , λ_{ω} и λ_{θ} - неотрицательные функции от $T, \varepsilon, \varepsilon_p, \omega, \theta$. Величина T_m отмечает пороговое значение температуры, при которой поры становятся активными (температура перехода легкоплавной составляющей композита в жидкое состояние). Определяющие соотношения принимают вид

$$\eta = -\frac{\partial \varphi}{\partial T}, \quad \boldsymbol{\sigma} = -p \mathbf{I} + \boldsymbol{\sigma}', \quad p = K \frac{\rho}{\rho_0} \ln \frac{\rho}{\rho_p}, \quad \boldsymbol{\sigma}' = 2\mu (\boldsymbol{\varepsilon}' - \boldsymbol{\varepsilon}'_p), \quad \boldsymbol{\varepsilon}'_p = \lambda_p \boldsymbol{\sigma}',$$

$$\mathbf{q} = k_q \nabla T, \quad U = \varphi - T \frac{\partial \varphi}{\partial T}, \quad \sigma_{\omega} = \rho \frac{\partial \varphi}{\partial \omega} (1 - \omega),$$

$$\frac{d\omega}{dt} = -H(\omega) k_{\omega} (\pi^{(1)}) (p + \sigma_{\omega}), \quad \frac{d\theta}{dt} = -H(\Phi) k_{\theta} (\pi^{(1)}) (\varphi - \varphi_{\omega})$$

где σ_ω - "напряжение спекания" [21-24]. Напряжение спекания и свободная энергия пор являются неотрицательными. При этом напряжение спекания обеспечивает уплотнение материала при условии, что поры активны $T \geq T_m$. Напряжение спекания не подчинено условиям равновесия. Оно представляет капиллярные силы, действующие на поверхности пор. Предел текучести и модули упругости в данной модели являются функциями повреждаемости и пористости, которые стремятся к нулю, если $\theta \rightarrow \infty$, $\omega \rightarrow 1$ и принимают значения для плотного материала при $\theta=0$, $\omega=0$. Оба структурных параметра: и повреждаемость, и пористость подчинены эволюционным определяющим уравнениям.

Пористость связана с объемной пластической деформацией и меняется под влиянием внешнего давления ("холодное прессование") и/или под влиянием напряжения спекания ("горячее спекание").

Таким образом, здесь показана связь уравнений теории спекания [21-24] с законами термодинамики и дана термодинамическая трактовка напряжения спекания. Уравнения использованы в расчетах и показали обещающие результаты по предсказанию формы и свойств спекаемых тел.

Авторы признательны В.Н.Кукуджанову за обсуждения и поддержку исследования.

Работа финансировалась Российским фондом фундаментальных исследований (проект 98-05-64751а).

Список литературы

1. Сокольников И.С. Математическая теория упругости. М., "Мир", 1961.
2. Седов Л.И. Введение в механику сплошной среды. М., Физматгиз, 1962. 284 с.
3. Седов Л.И. Механика сплошной среды. М.: Наука, 1976. Т.1. 535 с.; Т.2. 573 с.
4. Ильюшин А.А. Механика сплошной среды. М.: Изд-во МГУ, 1978. 287 с.
5. Malvern L.E. Introduction to the Mechanics of a Continuous Medium. Englewood Cliffs, NJ.:Prentice Hall 1969. 713 p.
6. Christensen R.M. Theory of viscoelasticity. An introduction. New York; London: Acad. Press 1971. 245 p.
7. Годунов С.К. Элементы механики сплошной среды. М.: Наука, 1978. 303 с.

8. Кукуджанов В.Н., Сантаоля К. Термодинамика вязкопластических сред с внутренними параметрами //Изв. РАН. МТТ. 1997. N2. С.115-126.
9. Циглер Г. Экстремальные принципы термодинамики необратимых процессов и механика сплошной среды. М.:Мир, 1966.135 с.
10. Коларов Д., Валтов А., Бончева Н. Механика пластических сред. М.: Мир, 1979. 302 с.
11. Кондауров В.И. Об уравнениях упруговязкопластической среды с конечными деформациями // ПМТФ. 1982. N4. С. 133-139.
12. Simo J.C., M. Ortiz M. A united-approach to finite deformation elastoplastic analysis based on the use of hyperelastic constitutive equations // Comput. Meth. Appl. Mech. Engng. 1985. V.49. N2. P. 221-245.
13. Бурого Н.Г., Кукуджанов В.Н. Решение упругопластических задач методом конечных элементов.Пакет прикладных программ "АСТРА":Препринт 326. М.: ИПМ АН СССР, 1988. 68 с.
14. Lee E.H. Elastic-plastic deformation at finite strains // Trans. ASME. ser.E, J. Appl. Mech. 1969. V. 36. N1. P. 1-6
15. Астарита Дж., Марруччи Дж. Основы гидромеханики неньютоновских жидкостей. М.: Мир, 1978. 309 с.
16. Глушко А.И. Об одном подходе к разрушению горных пород // Изв. АН СССР. МТТ. 1988. N3. С. 130-135.
17. Kukudzhanov V.N., Bourago N.G., Kovshov A.N., Ivanov V.L., Shneiderman D.N. On the problem of Damage and Localization of Strains. Preprint 1995:10. Goteborg: Chalmers Univ.Technol., 1995. 35 p.
18. Ковшов А.Н. О локализации деформаций в неупругом слое, вызванной движением массивного штампа // Изв. РАН. МТТ. 1996. N4. С. 47-53.
19. Бурого Н.Г. Формулировка уравнений механики сплошной среды в подвижных адаптивных координатах. В кн. "Численные методы в механике деформируемого твердого тела", М.: ВЦ АН СССР, 1984, с. 34-49.
20. Lemaitre J. A course on Damage Mechanics. Springer-Verlag, 1992.
21. Mechanics of granular materials and powder systems. ASME, MD-Vol. 37, 141 pp., 1992
22. German R.M. Liquid phase sintering, Plenum Press, New-York, 240 pp., 1985
23. Riedel H. and Sun D.-Z. Simulation of die pressing and sintering of powder metals, hard metals and ceramics, Numer. Meth. in Indust. Proc., Balkema, Rotterdam, pp. 883-886, 1992
24. Chenot J.-L., Bay F. and Fourment L. Finite element simulation of metal powder forming, Int. J. Numer. Meth. Engng., vol. 30, pp. 1649-1674, 1990.

Москва

Поступила в редакцию
26.03.1999