УДК 539.3

Член-кореспондент НАН України **Я. Й. Бурак, Є. Я. Чапля, В. Ф. Кондрат, О. Р. Грицина**

Математичне моделювання термомеханічних процесів у пружних тілах із врахуванням локального зміщення маси

Using the methods of continuum mechanics and non-equilibrium thermodynamics, a model for coupled processes in thermoelastic isotropic solids is proposed taking into account the local displacement of a mass which is caused, for example, by a body structure ordering. It is shown that this approach results in expanding the state parameters space, non-local constitutive equations, redefining the stress tensor, and occurrence of additional volume forces.

1. У класичних моделях термопружних систем [1, 2] здебільшого не враховують локального зміщення маси, яке може спричинюватися, наприклад, локальним упорядкуванням структури тіла. Внаслідок такого упорядкування, зазвичай, виникає додатковий потік маси. Такий потік спостерігається, зокрема, при русі зі змінним прискоренням елементів тіла, молекули якого характеризуються несиметричною за масою структурою; при поляризації тіла; виникненні нової поверхні тощо. Врахування локального зміщення маси для опису приповерхневої неоднорідності на основі лагранжевого підходу проводилось у роботах [3, 4].

У даній роботі за підходом Ейлера з використанням методів термодинаміки нерівноважних процесів та механіки суцільного середовища сформульовано основні співвідношення термомеханіки пружних систем, в яких спостерігається локальне зміщення маси.

2. Об'єкт дослідження. Розглядаємо ізотропне термопружне тіло, яке займає область (V) евклідового простору та обмежене гладкою поверхнею (Σ).

Тіло перебуває під впливом зовнішньої силової та теплової дій. У результаті цього в ньому протікають деформаційні та теплові процеси, а також відбувається зміна локальної структури тіла, яка призводить до виникнення додаткового потоку маси густини $\vec{J}_*$. Як звичайно, деформаційні процеси будемо характеризувати тензорами деформацій $\widehat{e}$ та напруження $\widehat{\sigma}$, а теплові — ентропією S, абсолютною температурою T та потоком тепла $\vec{J}_q$ (або потоком ентропії $\vec{J}_s$, який пов'язаний із потоком тепла співвідношенням $\vec{J}_s = \vec{J}_q/T$).

Усі поля, які характеризують процеси, що протікають у тілі, повинні задовольняти фундаментальні закони фізики — балансу маси, імпульсу, ентропії та енергії.

3. Рівняння балансу маси. Базові співвідношення математичної моделі розглядуваного тіла будемо формулювати за підходом Ейлера. Тоді закон збереження маси у припущенні, що в довільній області тіла маса не виробляється, в інтегральній формі має вигляд [1]

$$\frac{d}{dt}\int\limits_{(V)} \rho dV = -\int\limits_{(\Sigma)} \vec{J}\cdot\vec{n}d\Sigma. \qquad (1)$$

Тут $\vec{J}$ — вектор густини потоку маси; ρ — густина маси; $\vec{n}$ — зовнішня нормаль до поверхні (Σ), що обмежує область (V); крапкою позначено скалярний добуток.

Приймемо, що вектор $\vec{J}$ визначається сумою конвективної складової $\rho\vec{v}_*$ (де $\vec{v}_*$ — середня швидкість частинок тіла) та складовою $\vec{J}_*$, тобто

$$\vec{J} = \rho\vec{v}_* + \vec{J}_*. \tag{2}$$

Якщо, згідно з формулою

$$\vec{\Pi}_m(\vec{r}, t) = \int\limits_0^t \vec{J}_*(\vec{r}, t')\, dt', \tag{3}$$

ввести вектор зміщення маси $\vec{\Pi}_m$, то для потоку $\vec{J}_*$ одержимо

$$\vec{J}_* = \frac{\partial\vec{\Pi}_m}{\partial t}. \tag{4}$$

Такий потік маси вперше введено у роботі [5], а в [3, 4] застосовано для аналізу приповерхневих явищ. Відзначимо також, що подібним чином описується вектор електричного зміщення [6].

Враховуючи співвідношення (2) та (4), рівняння (1) балансу маси можемо записати так:

$$\int\limits_{(V)} \frac{\partial\rho}{\partial t} dV = -\int\limits_{(\Sigma)} \left(\rho\vec{v}_* + \frac{\partial\vec{\Pi}_m}{\partial t}\right) \cdot \vec{n} d\Sigma. \tag{5}$$

За використання теореми Остроградського–Гаусса рівняння (5) у локальній формі набуде вигляду

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot \left(\rho\vec{v}_* + \frac{\partial\vec{\Pi}_m}{\partial t}\right), \tag{6}$$

де $\vec{\nabla}$ — оператор Гамільтона. Якщо для формулювання закону збереження маси використати уявлення про континуум центрів мас, то

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot (\rho\vec{v}), \tag{7}$$

де $\vec{v}$ — вектор швидкості центра маси частинок тіла, для якого маємо таке співвідношення:

$$\vec{v} = \frac{1}{\rho}\left(\rho\vec{v}_* + \frac{\partial\vec{\Pi}_m}{\partial t}\right). \tag{8}$$

Враховуючи, що

$$\vec{J}_m = \rho(\vec{v}_* - \vec{v}), \tag{9}$$

рівняння балансу маси можна записати ще так:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot \left(\rho\vec{v} + \vec{J}_m + \frac{\partial\vec{\Pi}_m}{\partial t}\right). \tag{10}$$

4. Рівняння балансу ентропії. Швидкість зміни ентропії елемента тіла визначається притоком ентропії ззовні, виникненням ентропії за одиницю часу та тепловими джерелами, тобто

$$\frac{d}{dt}\int\limits_{(V)} SdV = -\int\limits_{(\Sigma)} S\vec{v}\cdot\vec{n}d\Sigma + \int\limits_{(V)}\sigma_s dV + \int\limits_{(V)}\rho\frac{\mathfrak{R}}{T}dV, \tag{11}$$

де σ_s — виробництво ентропії; $\mathfrak{R}$ — питома потужність теплових джерел.

Рівняння (11) у локальній формі буде таким:

$$T\frac{\partial S}{\partial t} = -T\vec{\nabla}\cdot\vec{J}_s + T\sigma_s + \rho\mathfrak{R}. \tag{12}$$

Якщо ввести у розгляд питому ентропію $s = S/\rho$ і врахувати співвідношення $\vec{J}_s = \vec{J}_q/T$, яке пов'язує вектори потоків тепла та ентропії, то з формули (12) одержимо

$$\rho T\frac{ds}{dt} = -\vec{\nabla}\cdot\vec{J}_q + \frac{1}{T}\vec{J}_q\cdot\vec{\nabla}T + T\sigma_s + \rho\mathfrak{R}. \tag{13}$$

Тут $d\cdots/dt = \partial\cdots/\partial t + \vec{v}\cdot\vec{\nabla}\cdots$ — оператор субстанціональної похідної за часом.

5. Рівняння балансу енергії. Згідно з законом збереження енергії, повна енергія системи повинна зберігатися. Приймаємо, що повна енергія у довільний момент часу є сумою внутрішньої та кінетичної енергій і зміна її відбувається внаслідок наявності конвективної складової потоку внутрішньої та кінетичної енергій через поверхню тіла, роботи внутрішніх поверхневих сил, потоку тепла, роботи, затраченої на масоперенесення і на упорядкування структури тіла, дії масових сил $\vec{F}$ та розподілених теплових джерел $\mathfrak{R}$

$$\frac{d}{dt}\int\limits_{(V)}\rho\left(u+\frac{1}{2}\vec{v}^2\right)dV = -\int\limits_{(\Sigma)}\left[\rho\left(u+\frac{1}{2}\vec{v}^2\right)\vec{v} + \vec{J}_q + \mu\vec{J}_m + \mu_\pi\frac{\partial\vec{\Pi}_m}{\partial t} - \widehat{\sigma}\cdot\vec{v}\right]\cdot\vec{n}d\Sigma + $$
$$+\int\limits_{(V)}(\rho\vec{F}\cdot\vec{v} + \rho\mathfrak{R})dV, \tag{14}$$

де u — питома внутрішня енергія; $\widehat{\sigma}$ — тензор напружень Коші; μ — хімічний потенціал; μ_π — потенціал, пов'язаний з потоком $\partial\vec{\Pi}_m/\partial t$.

Враховуючи рівняння балансу маси (7) та ентропії (13), з рівняння балансу енергії (14) у локальній формі отримаємо

$$\rho\frac{du}{dt} = \rho T\frac{ds}{dt} + \widehat{\sigma} : \frac{d\widehat{e}}{dt} - \vec{\nabla}\mu'_\pi\cdot\frac{\partial\vec{\Pi}_m}{\partial t} - \mu'_\pi\frac{\partial\vec{\nabla}\cdot\vec{\Pi}_m}{\partial t} - \frac{1}{T}\vec{J}_q\cdot\vec{\nabla}T - T\sigma_s -$$
$$-\vec{v}\cdot\left(\rho\frac{d\vec{v}}{dt} - \vec{\nabla}\cdot\widehat{\sigma} - \rho\vec{F}\right). \tag{15}$$

Тут $\mu'_\pi = \mu_\pi - \mu$; $\widehat{e}$ — тензор деформації Альманзі, який у лінійному наближенні визначається через вектор переміщення $\vec{u}$ співвідношенням Коші [7]

$$\widehat{e} = \frac{\vec{\nabla}\otimes\vec{u} + \vec{u}\otimes\vec{\nabla}}{2};$$

"$\otimes$" — діадний добуток.

Якщо ввести питомі величини $\vec{\pi}_m = \vec{\Pi}_m/\rho$, $\rho_\pi = P_\pi/\rho$, де $P_\pi = \vec{\nabla} \cdot \vec{\Pi}_m$, і врахувати рівняння балансу маси (7), то прийдемо до такого рівняння балансу внутрішньої енергії:

$$\rho\frac{du}{dt} = \rho T\frac{ds}{dt} + \widehat{\sigma}_* : \frac{d\widehat{e}}{dt} - \rho\mu'_\pi\frac{d\rho_\pi}{dt} - \rho\vec{\nabla}\mu'_\pi \cdot \frac{d\vec{\pi}_m}{dt} - T\sigma_s - \frac{1}{T}\vec{J}_q \cdot \vec{\nabla}T - \\ - \vec{v} \cdot \left(\rho\frac{d\vec{v}}{dt} - \vec{\nabla} \cdot \widehat{\sigma}_* - \rho\vec{F}_*\right), \tag{16}$$

де

$$\widehat{\sigma}_* = \widehat{\sigma} + \vec{\nabla} \cdot (\rho\vec{\pi}_m\mu'_\pi)\widehat{I}, \qquad \rho\vec{F}_* = \rho\vec{F} - \vec{\nabla} \cdot (\rho\vec{\pi}_m \otimes \vec{\nabla}\mu'_\pi), \tag{17}$$

$\widehat{I}$ — одиничний тензор. За умови інваріантності рівняння балансу енергії щодо просторових трансляцій з рівняння (16) отримуємо рівняння руху

$$\rho\frac{d\vec{v}}{dt} = \vec{\nabla} \cdot \widehat{\sigma}_* + \rho\vec{F}_*, \tag{18}$$

вираз для виробництва ентропії

$$\sigma_s = -\frac{1}{T^2}\vec{J}_q \cdot \vec{\nabla}T \tag{19}$$

та узагальнене рівняння Гіббса

$$du = Tds + \frac{1}{\rho}\widehat{\sigma}_* : d\widehat{e} - \mu'_\pi d\rho_\pi - \vec{\nabla}\mu'_\pi \cdot d\vec{\pi}_m. \tag{20}$$

У такому разі можна прийняти, що внутрішня енергія є функцією незалежних параметрів s, $\widehat{e}$, ρ_π, $\vec{\pi}_m$. Отже, врахування потоку маси, спричиненого упорядкуванням структури тіла, призводить до розширення, порівняно з класичною теорією термопружності, простору параметрів стану (новими параметрами є ρ_π та $\vec{\pi}_m$), а також до виникнення додаткового тиску $p = -\vec{\nabla} \cdot (\rho\vec{\pi}_m\mu'_\pi)$ і масової сили $\vec{F}_m = -\vec{\nabla} \cdot (\rho\vec{\pi}_m\vec{\nabla}\mu'_\pi)$.

6. Визначальні співвідношення. Перейдемо в рівнянні (20) до узагальненої питомої вільної енергії Гельмгольца f

$$f = u - Ts + \vec{\pi}_m \cdot \vec{\nabla}\mu'_\pi. \tag{21}$$

Тоді отримаємо

$$df = -sdT + \frac{1}{\rho}\widehat{\sigma}_* : d\widehat{e} - \mu'_\pi d\rho_\pi + \vec{\pi}_m \cdot d\vec{\nabla}\mu'_\pi. \tag{22}$$

Приймаючи вільну енергію f функцією незалежних параметрів $\widehat{e}$, T, ρ_π, $\vec{\nabla}\mu'_\pi$, тобто $f = f(\widehat{e}, T, \rho_\pi, \vec{\nabla}\mu'_\pi)$, приходимо до таких рівнянь стану:

$$\begin{aligned} s &= -\frac{\partial f}{\partial T}\bigg|_{\widehat{e},\rho_\pi,\vec{\nabla}\mu'_\pi}, \qquad \widehat{\sigma}_* = \rho\frac{\partial f}{\partial \widehat{e}}\bigg|_{T,\rho_\pi,\vec{\nabla}\mu'_\pi}, \\ \mu'_\pi &= -\frac{\partial f}{\partial \rho_\pi}\bigg|_{\widehat{e},T,\vec{\nabla}\mu'_\pi}, \qquad \vec{\pi}_m = \frac{\partial f}{\partial \vec{\nabla}\mu'_\pi}\bigg|_{\widehat{e},T,\rho_\pi}. \end{aligned} \tag{23}$$

Зауважимо, що якщо вигляд функції f є відомий, то рівняння стану (23) можна записати в явному вигляді.

Вираз для виробництва ентропії (19) використаємо для встановлення зв'язку між параметрами процесу, тобто між термодинамічними потоками і силами. Якщо прийняти лінійне наближення, то прийдемо до відомого закону Фур'є [1, 2]

$$\vec{J}_q = -\lambda \vec{\nabla} T. \tag{24}$$

Тут λ — кінетичний коефіцієнт (коефіцієнт теплопровідності), який у загальному випадку є функцією параметрів стану.

Таким чином, рівняння балансу маси (7) та ентропії (13), рівняння руху (18), визначальні співвідношення (23) і (24), за означеності вільної енергії як функції параметрів $\widehat{e}$, T, ρ_π, $\vec{\pi}_m$, разом із співвідношенням Коші складають повну систему рівнянь для визначення взаємозв'язаних полів у пружно-деформівних тілах за урахування локального зміщення маси.

1. *Де Грот С., Мазур П.* Неравновесная термодинамика. – Москва: Мир, 1964. – 456 с.
2. *Коваленко А. Д.* Основы термоупругости. – Киев: Наук. думка, 1987. – 307 с.
3. *Бурак Я. Й., Нагірний Т. С., Грицина О. Р.* Про один підхід до врахування приповерхневої неоднорідності в термомеханіці твердих розчинів // Доп. АН України. – 1991. – № 11. – С. 47–51.
4. *Бурак Я. Й., Нагірний Т. С.* Теоретичні основи розрахунку локально-градієнтних термомеханічних систем з врахуванням поверхневих явищ // Фіз.-хім. механіка матеріалів. – 1993. – № 4. – С. 24–30.
5. *Бурак Я. Й.* Визначальні співвідношення локально-градієнтної термомеханіки // Доп. НАН України. Сер. А. – 1987. – № 12. – С. 19–23.
6. *Бредов М. М., Руменцев В. В., Топтыгин И. Н.* Классическая электродинамика. – Москва: Наука, 1985. – 400 с.
7. *Лурье А. И.* Нелинейная теория упругости. – Москва: Наука, 1980. – 512 с.

Центр математичного моделювання
Інституту прикладних проблем
механіки і математики
ім. Я. С. Підстригача НАН України, Львів

Надійшло до редакції 04.12.2006