О. Гачкевич
Професор, д-р фіз.-мат. наук,
Інститут прикладних проблем
механіки і математики
ім. Я. С. Підстригача НАН України,
м. Львів; Політехніка Опольська,
м. Ополє, Польща

О. Онишко
Канд. фіз.-мат. наук,
Інститут прикладних проблем
механіки і математики ім. Я. С.
Підстригача НАН України, м. Львів

Б. Боженко
Ст. наук. співр., канд. фіз.-мат. наук,
Політехніка Опольська, м. Ополє,
Польща; Центр математичного
моделювання Інституту прикладних
проблем механіки і математики ім. Я.
С. Підстригача НАН України, м. Львів

А. Станік-Беслер
Доктор наук,
Політехніка Опольська,
м. Ополє, Польща

Ю. Няшин
Професор, д-р техн. наук

В. Лохов
Доцент, канд. фіз.-мат. наук

Пермський технічний університет,
м. Перм, Росія

УДК 539.3:536.424

МОДЕЛЮВАННЯ ПОВЕДІНКИ ТЕРМОПРУЖНИХ ТІЛ В ОБЛАСТІ СТРУКТУРНИХ ПЕРЕТВОРЕНЬ ЗА ВИКОРИСТАННЯ ТЕРМОДИНАМІЧНОГО ПОТЕНЦІАЛУ ГІБСА

Сформульований варіант математичної моделі кількісного опису термомеханічних процесів у деформівних твердих тілах, викликаних комплексними навантаженнями, при врахуванні структурних перетворень. При цьому використано формалізм термодинаміки незворотних процесів за умов застосовності принципу локальної рівноваги. За термодинамічні параметри, що описують механічні процеси, вибрано інваріанти тензорів напружень і деформацій, а за функцію стану – термодинамічний потенціал Гібса. З використанням методів механіки суцільного середовища записані узагальнене рівняння Гібса і система рівнянь стану моделі для випадку малого відхилення від початкового рівноважного стану. На цій підставі з врахуванням рівнянь балансу маси, кількості руху та повної енергії отримана система диференціальних рівнянь моделі. Сформульовані відповідні початкові та граничні умови.

термомеханічні процеси, структурні перетворення, фазовий склад, термодинамічний потенціал Гібса, розв'язувальна система рівнянь

При побудові моделей для кількісного опису термомеханічних процесів у деформівних твердих тілах з урахуванням впливу полів немеханічної природи за функцію термодинамічного стану часто приймають вільну енергію Гельмгольца. Зокрема, саме такий підхід був використаний при формулюванні моделі поведінки тіл за термосилового навантаження з урахуванням структурних перетворень і при подальшій модифікації її з метою отримання залежності кульової та девіаторної частин тензорів напружень і деформацій від змін структури [1]. За параметри стану, що відображають теплові процеси, вибирали абсолютну температуру T і питому ентропію S. Структурні перетворення різного роду характеризували при допомозі параметрів Ξ_j та A_j $(j = 1,2,\ldots,n)$, де Ξ_j – відносний вміст j-тої фази, що утворюється, в одиниці об'єму $(0 \le \Xi_j \le 1)$, A_j – питома спорідненість j-го перетворення. Механічні впливи, пов'язані зі зміною об'єму, враховували через інваріанти σ, e тензорів напружень і деформацій, а механічні впливи, пов'язані зі зміною форми тіла, — відповідно через інваріанти σ_i та

e_i, де $s = \Pi_1/3$ – середній гідростатичний тиск; $e = I_1/3$ – відносна зміна середніх лінійних розмірів; $\sigma_i = \sqrt{\dfrac{3\Pi_2 - \Pi_1^2}{2}}$; $e_i = \sqrt{\dfrac{3I_2 - I_1^2}{2}}$ – інтенсивності напружень і деформацій; $\Pi_1 = \sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33}$ – перший інваріант тензора напружень; $I_1 = \varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33}$ – перший інваріант тензора деформацій; $\Pi_2 = \sigma_{11}^2 + \sigma_{22}^2 + \sigma_{33}^2 + 2\left(\sigma_{12}^2 + \sigma_{13}^2 + \sigma_{23}^2\right)$ – другий інваріант тензора напружень; $I_2 = \varepsilon_{11}^2 + \varepsilon_{22}^2 + \varepsilon_{33}^2 + 2\left(\varepsilon_{12}^2 + \varepsilon_{13}^2 + \varepsilon_{23}^2\right)$ – другий інваріант тензора деформацій.

У цьому випадку вільна енергія $F = F\left(e, e_i, T, \Xi_1, \Xi_2, \ldots, \Xi_j, \ldots, \Xi_n\right)$ є функцією параметрів e, e_i, T і Ξ_j $\left(j = 1, 2, \mathbf{K}, n\right)$.

Використання такого підходу при розв'язуванні конкретних задач виникає потреба визначати характеристики матеріалу, пов'язаних зі зміною структури. Ця проблема є простішою, якщо за функцію стану вибрати термодинамічний потенціал Гібса [2], який для такої моделі має вигляд $G = G\left(\sigma, \sigma_i, T, \Xi_j\right)$ і пов'язаний з вільною енергією виразом

$$G = F - 3\sigma e - \sigma_i e_i . \qquad (1)$$

Тоді узагальнене рівняння Гібса для областей тіла, в яких відбуваються структурні перетворення, запишеться у вигляді

$$dG = -SdT - \frac{3}{\rho} e d\sigma - \frac{1}{\rho} e_i d\sigma_i + \sum_{j=1}^{n} A_j d\Xi_j . \qquad (2)$$

Тут ρ – густина матеріалу.

У випадку малого відхилення від початкового рівноважного стану за припущення, що природній стан є ненапружений ($T = T_0$, $S = S_0$, $e = 0$, $\sigma = 0$, $e_i = 0$, $\sigma_i = 0$, $\Xi = \Xi_{j0}$, $A = A_{j0}$) розкладемо вільну енергію F у степеневий ряд в околі вихідного стану за приростами термодинамічних параметрів. Обмежившись квадратичними членами розкладу, матимемо:

$$G = G^* - S_0 t + \sum_{j=1}^{n} A_{j0} \xi_j + \frac{1}{2\rho K}\sigma^2 + \frac{1}{2\rho G'}\sigma_i^2 - \frac{c_t}{2T_0} t^2 -$$

$$-\frac{1}{\rho}\alpha t \sigma - \frac{1}{\rho}\alpha' t \sigma_i + \sum_{j=1}^{n} \overline{K}_j t \xi_j - \frac{1}{\rho}\sum_{j=1}^{n} \beta_j \sigma \xi_j -$$

$$-\frac{1}{\rho}\sum_{j=1}^{n} \beta'_j \sigma_i \xi_j + \frac{1}{\rho} K^* \sigma \sigma_i + \sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{n} \widetilde{K}_{jk} \xi_j \xi_k , \qquad (3)$$

де $t = T - T_0$, $\xi_j = \Xi_j - \Xi_{j0}$.

Зі співвідношень (2) і (3) отримаємо таку систему рівнянь стану моделі:

$$S = -\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_{\sigma, \sigma_i, \Xi_1, \mathbf{K}, \Xi_n} = S_0 + \frac{c_t}{T_0} t + \frac{1}{\rho}\alpha\sigma + \frac{1}{\rho}\alpha'\sigma_i - \sum_{j=1}^{n} \overline{K}_j \xi_j ,$$

$$3e = -\rho\left(\frac{\partial G}{\partial \sigma}\right)_{T, \sigma_i, \Xi_1, \mathbf{K}, \Xi_n} = \frac{1}{K}\sigma + K^* \sigma_i + \alpha t + \sum_{j=1}^{n} \beta_j \xi_j ,$$

$$e_i = -\rho\left(\frac{\partial G}{\partial \sigma_i}\right)_{T, \sigma, \Xi_1, \mathbf{K}, \Xi_n} = \frac{1}{G'}\sigma_i + K^* \sigma + \alpha' t + \sum_{j=1}^{n} \beta'_j \xi_j ,$$

$$A_j = \left(\frac{\partial G}{\partial \Xi}\right)_{T, \sigma, \sigma_i, \Xi_1, \mathbf{K}, \Xi_{j-1}, \Xi_{j+1}, \mathbf{K}, \Xi_n} = A_{j0} + \sum_{k=1}^{n} \widetilde{K}_{jk} \xi_k +$$

$$+\overline{K}_j t - \frac{1}{\rho}\beta_j \sigma - \frac{1}{\rho}\beta'_j \sigma_i , \qquad j = 1, 2, \mathbf{K}, n . \qquad (4)$$

Коефіцієнти у (3), (4) характеризують певні фізичні властивості матеріалу моделі. Окремі з них відомі і визначені експериментально, фізичний зміст інших – такий:

$c_t = T_0 \left(\dfrac{\partial^2 G}{\partial T^2}\right)_{\sigma, \sigma_i, \Xi_1, \ldots, \Xi_n}$ – питома теплоємність;

$\dfrac{1}{K} = \rho\left(\dfrac{\partial^2 G}{\partial \sigma^2}\right)_{T, \sigma_i, \Xi_1, \ldots, \Xi_n}$, K – модуль всестороннього стиску;

$\dfrac{1}{G'} = \rho\left(\dfrac{\partial^2 G}{\partial \sigma_i^2}\right)_{T, \sigma, \Xi_1, \ldots, \Xi_n}$, G' – модуль зсуву;

$\alpha = \rho\left(-\dfrac{\partial^2 G}{\partial \sigma \partial T}\right)_{\sigma_i, \Xi_1, \ldots, \Xi_n}$ – температурний коефіцієнт об'ємного розширення;

$\alpha' = \rho\left(-\dfrac{\partial^2 G}{\partial \sigma_i \partial T}\right)_{\sigma, \Xi_1, \ldots, \Xi_n}$ – температурний коефіцієнт залежності від σ_i;

$\overline{K}_j = \left(\dfrac{\partial^2 G}{\partial T \partial \Xi_j}\right)_{\sigma, \sigma_i, \Xi_1, \ldots, \Xi_{j-1}, \Xi_{j+1}, \ldots, \Xi_n}$ – коефіцієнт залежності спорідненості j-го перетворення від температури;

$\beta_j = \rho\left(-\dfrac{\partial^2 G}{\partial \sigma \partial \Xi_j}\right)_{T, \sigma_i, \Xi_1, \ldots, \Xi_{j-1}, \Xi_{j+1}, \ldots, \Xi_n}$ – коефіцієнт зміни об'єму при j-му перетворенні;

$\beta'_j = \rho\left(-\dfrac{\partial^2 G}{\partial \sigma_i \partial \Xi_j}\right)_{T, \sigma, \Xi_1, \ldots, \Xi_{j-1}, \Xi_{j+1}, \ldots, \Xi_n}$ – коефіцієнт зміни форми при j-му перетворенні;

$K^* = \rho\left(\dfrac{\partial^2 F}{\partial \sigma \partial \sigma_i}\right)_{T, \Xi_1, \ldots, \Xi_n}$ – коефіцієнт залежності всестороннього стиску e від σ_i;

$\widetilde{K}_{jk} = \left(\dfrac{\partial^2 G}{\partial \Xi_j \partial \Xi_k}\right)_{T, \sigma, \sigma_i, \Xi_1, \ldots, \Xi_{j-1}, \Xi_{j+1}, \ldots, \Xi_{k-1}, \Xi_{k-1}, \ldots \Xi_n}$ – коефіцієнт залежності спорідненості j -го перетворення від ступеня повноти k -го перетворення.

Співвідношення (3), (4) записані для найзагальнішого випадку. Проте, оскільки в літературі не зазначені будь-які відомості про безпосередню залежність параметра e_i від зміни об'єму і температури, то можна прийняти, що $K^* = \alpha' = 0$. З урахуванням цього рівняння стану (4) набувають вигляду:

$$S = S_0 + \frac{c_t}{T_0}t + \frac{1}{\rho}\alpha\sigma - \sum_{j=1}^{n}\overline{K}_j\xi_j\ , \quad 3e = \frac{1}{K}\sigma + \alpha t + \sum_{j=1}^{n}\beta_j\xi_j\ ,$$

$$e_i = \frac{1}{G'}\sigma_i + \sum_{j=1}^{n}\beta'_j\xi_j\ ,$$

$$A_j = A_{j0} + \sum_{k=1}^{n}\widetilde{K}_{jk}\xi_k + \overline{K}_j t - \frac{1}{\rho}\beta_j\sigma - \frac{1}{\rho}\beta'_j\sigma_i\ ,$$

$$j = 1,2,\mathbf{K},n\ . \tag{5}$$

Вирази для компонентів тензора деформацій отримаємо за допомогою відомого співвідношення [3]

$$e_{jk} = e\delta_{jk} + \frac{3e_i}{2\sigma_i}\left(\sigma_{jk} - \sigma\delta_{jk}\right), \quad j = 1,2,3, \quad k = 1,2,3\ . \tag{6}$$

Тут δ_{jk} – символ Кронекера. Підставивши у (6) вирази для e і e_i з (5), матимемо

$$3e_{jk} = \left(\frac{1}{K}\sigma + \alpha t + \sum_{r=1}^{n}\beta_r\xi_r\right)\delta_{jk} +$$

$$+\frac{9\left(\sigma_{jk} - \sigma\delta_{jk}\right)}{2\sigma_i}\left(\frac{1}{G'}\sigma_i + \sum_{r=1}^{n}\beta'_r\xi_r\right). \tag{7}$$

Рівняння (2) і (5) сформульовані для розширеного простору параметрів стану і описують множину можливих (допустимих) фазових станів. Фізично реалізований стан відносно j -го перетворення за фіксованих значень деформації, температури та всіх інших перетворень і за припущення про миттєве встановлення рівноваги (яка відповідає досягнутій температурі й напруженням) визначається з умови мінімуму термодинамічного потенціалу Гібса G відносно ступеня повноти перетворення Ξ_j. Отже, в області протікання j -го перетворення повинна виконуватись залежність

$$\frac{\partial G}{\partial \Xi_j} = 0\text{, або } A_j = 0\ . \tag{8}$$

З (8) і останнього з рівнянь стану (5) отримуємо співвідношення, що пов'язує ступінь повноти j -го перетворення з іншими параметрами стану, а саме:

$$\sum_{k=1}^{n}\widetilde{K}_{jk}\xi_k + \overline{K}_j t - \frac{1}{\rho}\beta_j\sigma - \frac{1}{\rho}\beta'_j\sigma_i = 0\ , \quad j = 1,2,\mathbf{K},n\ . \tag{9}$$

Система балансових співвідношень моделі складається з рівнянь збереження маси, кількості руху і балансу повної енергії, які відповідно мають вигляд [4]:

$$\frac{\partial\rho}{\partial\tau}\nabla\cdot(\rho\mathbf{v}) = 0\ , \tag{10}$$

$$\rho\frac{d\mathbf{v}}{d\tau} = \nabla\cdot\hat{\sigma}\ , \tag{11}$$

$$\frac{\partial W}{\partial\tau} = -\nabla\cdot\mathbf{J}_W\ , \tag{12}$$

де $\mathbf{v}$ – вектор швидкості матеріальних точок, $\nabla = \mathbf{e}_k\dfrac{\partial}{\partial x_k}$ – набла-оператор у декартовій системі координат, $\mathbf{e}_k$ $(k = 1,2,3)$ – одиничні орти, $\hat{\sigma}$ – тензор напружень, $W = \rho\left(U + \dfrac{\mathbf{v}^2}{2}\right)$ – густина повної енергії, U – густина питомої внутрішньої енергії, $\mathbf{v}^2/2$ – густина питомої кінетичної енергії, $\mathbf{J}_W = \mathbf{J}_Q - \hat{\sigma}\cdot\mathbf{v} + W\mathbf{v}$ – потік повної енергії, $\mathbf{J}_Q$ – тепловий потік, $\hat{\sigma}\cdot\mathbf{v}$ – потік енергії, обумовлений механічною роботою поверхневих сил, $W\mathbf{v}$ – конвективний потік повної енергії.

З (12), (11) і (1) стандартним шляхом [4] легко вивести рівняння балансу ентропії, яке з урахуванням (8) за умови, що відбуваються всі n перетворень, має вигляд

$$\rho\frac{dS}{d\tau} = -\nabla\cdot\mathbf{J}_S + \sigma_S\ , \tag{13}$$

де $\mathbf{J}_S = \dfrac{\mathbf{J}_Q}{T}$ – потік ентропії, $\sigma_S = \dfrac{\mathbf{X}_Q\cdot\mathbf{J}_Q}{T}$ – вироблення ентропії, $\mathbf{X}_Q = -\dfrac{\nabla T}{T}$ – термодинамічна сила, спряжена з тепловим потоком $\mathbf{J}_Q$.

Відповідно до лінійної теорії Онзагера [4] приймаємо таке феноменологічне співвідношення:

$$\mathbf{J}_Q = -\lambda\nabla T\ , \tag{14}$$

де λ – коефіцієнт теплопровідності.

Виходячи із записаних вище балансових співвідношень (11), (12), рівнянь стану (5), (7), кінетичного рівняння (14), умови (8) і співвідношень Коші, запишемо систему диференціальних рівнянь відносно розв'язувальних функцій для області, в якій протікають всі n структурних перетворень. За розв'язувальні функції виберемо вектор переміщень $\mathbf{u}$, температуру T і ступені повноти перетворень Ξ_j $(j = 1,2,\ldots n)$. Вважаючи, що відхилення від стану рівноваги є малими (нехтуючи різницею між локальною та субстанціональною похідними і замінюючи густину ρ усередненим значенням ρ_0), отримаємо:

$$3\rho_0\frac{\partial^2\mathbf{u}}{\partial\tau^2} = -\frac{2G'}{e_i}\sum_{j=1}^{n}\beta'_j\nabla\xi_j\cdot\hat{\varepsilon} + \frac{2G'}{e_i^2}\sum_{j=1}^{n}\beta'_j\xi_j\nabla e_i\cdot\hat{\varepsilon} -$$

$$-K\alpha\nabla t+\frac{1}{3}\left[K-\frac{2G'}{e_i}\left(e_i-\sum_{j=1}^{n}\beta'_j\xi_j\right)\right]\nabla(\nabla\cdot\mathbf{u})-$$

$$-\sum_{j=1}^{n}\left[K\beta_j-\frac{2}{3}G'\beta'_j(\nabla\cdot\mathbf{u})\right]\nabla\xi_j+\left(K-\frac{2G'}{e_i^2}\sum_{j=1}^{n}\beta'_j\xi_j\right)\nabla e_i+$$

$$+\frac{G'}{e_i}\left(e_i-\sum_{j=1}^{n}\beta'_j\xi_j\right)\left[\nabla^2\mathbf{u}+\nabla(\nabla\cdot\mathbf{u})\right], \qquad (15)$$

$$\lambda\nabla^2 t=\left(\rho_0 c_t-\alpha^2 KT_0\right)\frac{\partial t}{\partial\tau}+3\alpha KT_0\frac{\partial(\nabla\cdot\mathbf{u})}{\partial\tau}-$$

$$-\sum_{j=1}^{n}\left(\alpha\beta_j+\overline{K}_j\right)T_0\frac{\partial\xi_j}{\partial\tau}, \qquad (16)$$

$$\sum_{k=1}^{n}\left(3\rho_0\tilde{K}_{jk}+\beta_j\beta_k K+3\beta'_j\beta'_k G'\right)\xi_k+\left(3\rho_0\overline{K}_j+\alpha\beta_j K\right)t-$$

$$-K\beta_j e-G'\beta'_j e_i=0, \qquad j=1,2,\ldots,n. \qquad (17)$$

Тут $\nabla^2=\nabla\cdot\nabla$ – оператор Лапласа, $\hat{\varepsilon}$ – тензор деформацій.

Систему рівнянь (15) – (17) потрібно доповнити відповідними граничними і початковими умовами. Звичайно приймається, що в початковий момент часу в тілі не відбуваються жодні структурні перетворення. Тоді початкові умови можна подати у вигляді:

$$\mathbf{u}\big|_{\tau=0}=\mathbf{u}_0, \quad \frac{\partial\mathbf{u}}{\partial\tau}\bigg|_{\tau=0}=\mathbf{f}, \quad T\big|_{\tau=0}=T_0. \qquad (18)$$

Механічні граничні умови задаються на поверхні тіла значеннями вектора зовнішніх зусиль $\mathbf{p}$ або вектора переміщень $\mathbf{u}_b$, тобто:

$$\hat{\sigma}\cdot\mathbf{n}=\mathbf{p}, \qquad \mathbf{u}=\mathbf{u}_b. \qquad (19)$$

Повинні також бути задані теплові граничні умови. За такі можна прийняти відомі умови 1-го, 2-го або 3-го роду [5]:

$$T=T_b, \; -\lambda(\nabla T)\cdot\mathbf{n}=\mathbf{J}_Q\cdot\mathbf{n}, \; (\nabla T)\cdot\mathbf{n}=H(T-T_c), \qquad (20)$$

де T_b – задана температура на поверхні тіла, H – відносний коефіцієнт тепловіддачі, T_c – температура зовнішнього середовища при конвективному теплообміні.

Отримана в рамках послідовного термодинамічного підходу нелінійна система рівнянь (15) – (17) разом з відповідними крайовими умовами (18) – (20) може бути використана для постановки і розв'язання задач визначення й оптимізації напруженого стану тіл складної внутрішньої будови за врахування її просторової неоднорідності і зміни під впливом термомеханічного навантаження.

За допомогою системи (15) – (17) можна аналізувати напружено-деформований стан тіл, в яких одночасно відбувається n структурних перетворень різного типу. Найчастіше ж доводиться мати справу з одним або двома перетвореннями. В рамках цього підходу авторами побудована відповідна система для опису поведінки тіл з пам'яттю форми, в яких відбувається мартенситне перетворення [6].

Таким чином, вибір за функцію стану термодинамічного потенціалу Гібса дає можливість спростити вихідні співвідношення для аналізу термомеханічних і структурних явищ у твердих тілах за рахунок зменшення кількості потрібних фізичних характеристик матеріалу і уточнення їхньої фізичної суті, а в результаті також отримати більш обґрунтовану процедуру їх експериментального визначення [2].

Література

1. *Асташкін В., Гачкевич О., Онишко О., Боженко Б.* Моделювання з використанням інваріантів тензорів напружень і деформацій термомеханічних процесів у деформівних твердих тілах при врахуванні структурних перетворень // Машинознавство. – 2003. – №11. – С. 14–17.

2. *Boyd J.G., Lagoudas D.C.* A thermodynamical constitutive model for shape memory materials // Int. J. of Plasticity. – 1996. – **12**, № 6. – P. 805–873.

3. *Гольденблат И.И.* Нелинейные проблемы теории упругости. – М.: Наука, 1969. – 336 с.

4. *Де Гроот С., Мазур П.* Неравновесная термодинамика. – М.: Мир, 1964. – 456 с.

5. *Седов Л.И.* Механика сплошной среды. – М.: Наука, 1973. – Т.1. – 535 с.

6. *Асташкін В., Боженко Б., Онишко О., Станік-Беслер А.* Варіант моделі опису термомеханічних явищ в тілах з пам'яттю форми // ІІ Міжнародна наукова конференція «Сучасні проблеми механіки та математики», Львів, 25 – 29.05.2008. В 3-х т. – Львів, 2008. – Т. 1. – С. 19 – 21.

Отримана 11.03.09

O. Gachkevych, O. Onyshko, B. Bozhenko, A. Stanik-Besler, Y. Nyashin, V. Lokhov

Modeling of the thermoelastic solids behavior in the domain of structure transformations with use of the Gibbs thermodynamic potential

Institute for Applied Problems of Mechanics and Mathematics National Academy of Sciences of Ukraine, Lviv; Politechnika Opolska, Opole, Poland; Perm State Technical University, Perm, Russia

A model variant for quantitative description of a thermomechanical behavior of deformable solids allowing for structure transformations with use of stress and strain tensor invariants is proposed. As a state function the Gibbs thermodynamic potential is chosen, the state equations and differential resolving system are written. The appropriate initial and boundary conditions are formulated.