

УДК 539.3

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕФОРМИРОВАНИЯ КОМПОЗИТОВ С УЧЁТОМ ТЕРМОДИФФУЗИИ

Б.Е. Победря, И.Л. Гузей (Москва)

Abstract

The model of plasticity theory taking into account thermodiffusion is under construction. As an example the problem for upsetting of composite band is considered.

§1. Введение

В работе [1] даны общие соотношения многокомпонентной деформируемой среды. Из основных постулатов механики сплошной среды получены уравнение неразрывности

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \vec{v}) = 0, \quad (1)$$

уравнения движения механики сплошной среды

$$\rho \frac{d\vec{v}}{dt} = \rho \vec{F} + \vec{S}_{i,i}. \quad (2)$$

Из законов термодинамики сплошной среды получено уравнение сохранения энергии

$$\rho \frac{de}{dt} = \sigma_{ij} \gamma_{ij} + \sum_{\alpha=1}^m \vec{F}^{(\alpha)} \cdot \vec{j}^{(\alpha)} + \rho q - q_{i,i} \quad (3)$$

и уравнение притока тепла

$$\rho T \frac{ds}{dt} = \rho q - q_{i,i} + w^*. \quad (4)$$

Уравнения неразрывности для каждого компонента могут быть записаны в виде

$$\rho \frac{dc^{(\alpha)}}{dt} + \operatorname{div} \vec{j}^{(\alpha)} = R_{\alpha}. \quad (5)$$

Все обозначения разъяснены в работе [1].

§2. Модель МДТТ, учитывающая термодиффузию

Для построения модели деформируемого твёрдого тела с учётом термодиффузии введём термодинамическую функцию состояния F - свободную энергию Гельмгольца и её плотность f :

$$F \equiv \int \rho f dV \quad (1)$$

по формулам

$$F = E - TS, \quad f = e - Ts. \quad (2)$$

Подставляя в (2) уравнения (1.3) и (1.4), получим

$$\rho \frac{df}{dt} = -\rho s \frac{dT}{dt} + \sigma_{ij} v_{ij} + \sum_{\alpha=1}^m \vec{F}^{(\alpha)} \cdot \vec{j}^{(\alpha)} - w^* \quad (3)$$

Предположим, что термодинамическими параметрами состояния искомой модели являются температура T и концентрации компонентов $c^{(\alpha)}$, т.е.

$$f = f(T, c^{(\alpha)}). \quad (4)$$

Определим теперь химический потенциал компонента α по формуле

$$\mu^{(\alpha)} = \frac{\partial f}{\partial c^{(\alpha)}} \quad (5)$$

и добавим и вычтем в правой части (3) выражение $\sum_{\alpha=1}^m \rho \mu_{\alpha} \frac{dc_{\alpha}}{dt}$. При этом учтём выражение (2.18) и очевидное тождество:

$$\mu^{(\alpha)} \operatorname{div} \vec{j}^{(\alpha)} = \operatorname{div}(\mu^{(\alpha)} \vec{j}^{(\alpha)}) - \vec{j}^{(\alpha)} \cdot \operatorname{grad} \mu^{(\alpha)}. \quad (6)$$

Тогда получим

$$\begin{aligned} \rho \frac{df}{dt} = & -\rho s \frac{dT}{dt} + \sigma_{ij} v_{ij} + \sum_{\alpha=1}^m \vec{F}^{(\alpha)} \cdot \vec{j}^{(\alpha)} - w^* + \rho \sum_{\alpha=1}^m \mu_{\alpha} \frac{dc_{\alpha}}{dt} + \\ & + \sum_{\alpha=1}^m \operatorname{div}(\mu^{(\alpha)} \vec{j}^{(\alpha)}) - \sum_{\alpha=1}^m \vec{j}^{(\alpha)} \operatorname{grad} \mu^{(\alpha)} - \sum_{\alpha=1}^m R_{\alpha} \mu^{(\alpha)}. \end{aligned} \quad (7)$$

Заметим, что из (5) следует

$$\sum_{\alpha=1}^m \mu^{(\alpha)} = 0. \quad (8)$$

Положим в (7), что

$$w^* = \sigma_{ij} v_{ij} + \sum_{\alpha=1}^m \left[\vec{F}^{(\alpha)} \cdot \vec{j}^{(\alpha)} + \operatorname{div} \left(\mu^{(\alpha)} \vec{j}^{(\alpha)} \right) - \vec{j}^{(\alpha)} \cdot \operatorname{grad} \mu^{(\alpha)} \right] - R, \quad (9)$$

где

$$R \equiv \sum_{\alpha=1}^m R_{\alpha} \mu^{(\alpha)} = \sum_{\alpha=1}^m \sum_{l=1}^N v_{\alpha l} \mu^{(\alpha)} J_l. \quad (10)$$

Тогда уравнение притока тепла (1.4) примет вид

$$\rho T \frac{ds}{dt} = \rho q - \operatorname{div} \left(\vec{q} - \sum_{\alpha=1}^m \mu^{(\alpha)} \vec{j}^{(\alpha)} \right) + \sigma_{ij} v_{ij} + \sum_{\alpha=1}^m \vec{j}^{(\alpha)} \cdot \left(\vec{F}^{(\alpha)} - \operatorname{grad} \mu^{(\alpha)} \right) - R. \quad (11)$$

Из (1.3) и (1.4) получим

$$\rho \frac{de}{dt} = \rho T \frac{ds}{dt} - w^* + \sigma_{ij} v_{ij} + \sum_{\alpha=1}^m \vec{F}^{(\alpha)} \cdot \vec{j}^{(\alpha)}. \quad (12)$$

Учитывая выражение функции рассеивания (9), находим из (12)

$$\rho \frac{de}{dt} = \rho T \frac{ds}{dt} - \sum_{\alpha=1}^m \left[\operatorname{div} \left(\mu^{(\alpha)} \vec{j}^{(\alpha)} \right) + \vec{j}^{(\alpha)} \cdot \operatorname{grad} \mu^{(\alpha)} \right] + R \quad (13)$$

или, сравнивая с (1.9)

$$\rho \frac{de}{dt} = \rho T \frac{ds}{dt} + \rho \sum_{\alpha=1}^m \mu^{(\alpha)} \frac{dc^{(\alpha)}}{dt}, \quad (14)$$

то есть получаем формулу Гиббса [5], которую можно записать в виде

$$de - T ds = \sum_{\alpha=1}^m \mu^{(\alpha)} dc^{(\alpha)}. \quad (15)$$

Для описания процессов термодиффузии кроме уравнений притока тепла (11) и диффузии (1.5) необходимо использовать определяющие соотношения, связывающие тепловые и диффузионные потоки, с одной стороны, и градиенты температуры и химических потенциалов — с другой.

Принимая эти соотношения линейными и удовлетворяющими условиям Онзагера [4], их можно записать в виде

$$q_i = -\Lambda_{ij} T_{,j} - \sum_{\alpha=1}^m A_{ij}^{(\alpha)} \mu_{,j}^{(\alpha)}, \quad (16)$$

$$j_i^{(\alpha)} = -A_{ij}^{(\alpha)} T_{,j} - \sum_{\beta=1}^m D_{ij}^{(\alpha)(\beta)} \mu_{,j}^{(\beta)}. \quad (17)$$

Если коэффициенты связанности $A_{ij}^{(\alpha)}$ отсутствуют, то соотношения (16) совпадают с законом теплопроводности Фурье, а соотношения (17) - с обобщённым законом Фика.

Поэтому тензор Λ_{ij} можно назвать тензором теплопроводности, а тензоры $D_{ij}^{(\alpha)(\beta)}$ - тензорами коэффициентов диффузии. Для изотропной среды эти тензоры являются шаровыми [3]:

$$\Lambda_{ij} = \Lambda \delta_{ij}, \quad D_{ij}^{(\alpha)(\beta)} = D^{(\alpha)(\beta)} \delta_{ij}. \quad (18)$$

В силу соотношений (8) число независимых парциальных коэффициентов диффузии $D^{(\alpha)(\beta)}$ с m^2 может быть сокращено до $(m-1)^2$.

Если попытаться приспособить создаваемую модель для описания обработки материалов, то к описанной системе уравнений следует добавить уравнения движения сплошной среды (1.2). Считая процессы квазистатическими, можно рассмотреть уравнения равновесия

$$\sigma_{ij,j} + \rho F_i = 0. \quad (19)$$

Механические свойства среды должны быть заданы дополнительно, хотя из предыдущего можно понять, что речь пойдёт о несжимаемой вязкой жидкости. Действительно, только для модели вязкой жидкости диссипация имеет вид [2]

$$w^* = \sigma_{ij} v_j, \quad (20)$$

причём под σ_{ij} понимаются "вязкие" напряжения, т.е. рассматривается случай несжимаемой жидкости, для которой уравнение неразрывности (1.1) имеет вид

$$\operatorname{div} \vec{v} = 0. \quad (21)$$

Заметим, что при отсутствии диффузионных эффектов функция рассеивания (9) совпадает с (20). Если не рассматриваются процессы разгрузки, то законы пластического течения, используемые в технологических задачах обработки материалов, совпадают с законами вязкой жидкости, вообще говоря, нелинейной.

Будем считать, что рассматриваются квазилинейные, т.е. тензорно линейные определяющие соотношения [3]. Тогда для замыкания системы уравнений, т.е. для полного описания модели среды введём, например, следующие определяющие соотношения:

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}(\cdot) v_{kl}, \quad (22)$$

$$s = aT + \sum_{\alpha=1}^m b_{\alpha} c^{(\alpha)}, \quad (23)$$

$$\mu^{(\alpha)} = b_{\alpha} T + \sum_{\beta=1}^m d^{(\alpha)(\beta)} c^{(\beta)}. \quad (24)$$

Здесь a , b_{α} , $d^{(\alpha)(\beta)}$ - некоторые материальные константы, а $C_{ijkl}(\cdot)$ — тензор-функция четвёртого ранга, зависящая от температуры T , концентраций $c^{(\alpha)}$ и инвариантов тензора скоростей деформации (для изотропного случая это будет $v_u \equiv \sqrt{v_{ij} v_{ij}}$).

Нетрудно видеть, что определяющие соотношения (23) не противоречат формуле Гиббса (15).

Если теперь подставим определяющие соотношения (22) в уравнения равновесия (19), то получим три уравнения равновесия относительно трёх компонент вектора скорости \vec{v} . Подставляя определяющие соотношения (24) в соотношения (16), (17), а результат и (23) в уравнения диффузии (1.5) и уравнение притока тепла (11), будем иметь систему $(m-1)+1 = m$ уравнений для определения $(m-1)$ независимых концентраций $c^{(\alpha)}$ и температуры T . В случае несжимаемой среды нужно ещё найти давление

$$p = -\frac{1}{3}\sigma_{kk}, \tag{25}$$

для чего необходимо воспользоваться уравнением неразрывности (21). Таким образом, мы получили замкнутую систему уравнений.

Сюда требуется добавить начальные данные:

$$t = 0: T = T^0, \quad c^{(\alpha)} = c_0^{(\alpha)} \tag{26}$$

и граничные условия, например

$$\sigma_{ij}n_j|_{\Sigma} = S_i^0, \tag{27}$$

$$\Lambda_{ij}T_{,j}n_i|_{\Sigma} = \beta(T - T_c), \tag{28}$$

$$\sum_{\beta=1}^m D_{ij}^{(\alpha)(\beta)} \mu_{,j}^{(\beta)} n_i|_{\Sigma} = \sum_{\beta=1}^n \gamma_{\alpha} (\mu^{(\beta)} - \mu_c^{(\beta)}), \tag{29}$$

где T_c - температура окружающей среды; $\mu_c^{(\beta)}$ - химический потенциал β -го компонента окружающей среды; β - коэффициент теплообмена, а $\gamma_{\alpha\beta}$ - коэффициенты массообмена.

§3. Осаживание композиционной полосы

Рассмотрим простейший пример. Пусть длинная полоса шириной l , состоящая из двух слоёв разного материала, осаждается двумя жёсткими плитами с силой \mathcal{R} (рис. 1).

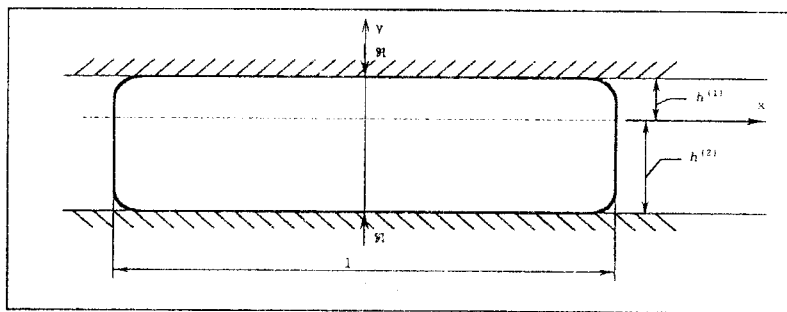


Рис. 1. Схема к постановке задачи

Будем считать, что длина полосы L (перпендикулярно плоскости чертежа) много больше её ширины l , которая в свою очередь много больше высоты

$$h = h^{(1)} + h^{(2)}. \quad (1)$$

Ширина и высота полосы изменяется в плоскости x, y . Все величины, относящиеся к первому материалу (выше оси x), будем снабжать верхним индексом (1), а относящиеся к второму материалу (ниже оси x) – индексом (2).

В силу условий (1) задачу для термодиффузионного процесса можно считать одномерной. Тогда из (2.16), (2.17) имеем

$$q = -A \frac{\partial T}{\partial y} - A \frac{\partial \mu}{\partial y}, \quad (2)$$

$$i = -A \frac{\partial T}{\partial y} - D \frac{\partial \mu}{\partial y}, \quad (3)$$

а из (2.23) и (2.24)

$$s = aT + bc, \quad (4)$$

$$\mu = bT + dc. \quad (5)$$

Уравнение диффузии (1.5) можно записать в виде

$$\rho \frac{dc}{dt} = -\frac{\partial j}{\partial y} + R_1, \quad (6)$$

а уравнение притока тепла (2.11) в виде

$$\rho T \frac{ds}{dt} = \rho q_0 - \frac{\partial q}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial y}(\mu j) + \sigma v - j \frac{\partial \mu}{\partial y} - R. \quad (7)$$

Рассмотрим самый простейший случай. Для этого предположим:

а) химические реакции отсутствуют: $R_1 = 0, R = 0$;

б) используется линеаризованное уравнение (7), для чего все нелинейные слагаемые отброшены;

в) массовый источник тепла отсутствует: $q_0 = 0$;

г) нет зависимости от времени, поэтому рассматриваем стационарный (установившийся) процесс. Тогда уравнение диффузии (6) даёт

$$\frac{\partial j}{\partial y} = 0 \Rightarrow j = \text{const}, \tag{8}$$

а уравнение притока тепла (7) -

$$\frac{\partial q}{\partial y} = 0 \Rightarrow q = \text{const}. \tag{9}$$

Поэтому из (2)-(5) имеем (рис. 2, 3)

$$T = T_0 + Q_0 y, \tag{10}$$

$$c = c_0 + \mu_0 y. \tag{11}$$

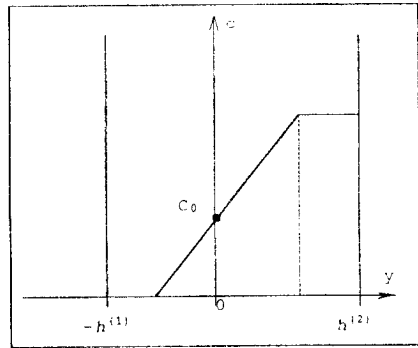
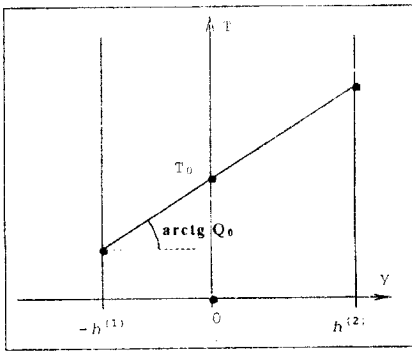


Рис.2. Распределение температуры Рис.3. Распределение концентрации

Рассмотрим теперь механическую задачу. Будем считать предел текучести каждого материала $\tau_0^{(\alpha)}$ ($\alpha = 1, 2$) известной функцией температуры T и концентрации компонентов ($c = c_1, c_2 = 1 - c$).

Тогда для каждого материала $\alpha = 1, 2$ имеем уравнения равновесия (2.19):

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \sigma_x^{(\alpha)}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{xy}^{(\alpha)}}{\partial y} &= 0 \\ \frac{\partial \sigma_{xy}^{(\alpha)}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_y^{(\alpha)}}{\partial y} &= 0 \end{aligned} \right\}, \tag{12}$$

где для компонент тензора деформации используем обозначения [6]:

$$\sigma_{11} = \sigma_x, \quad \sigma_{22} = \sigma_y, \quad \sigma_{12} = \sigma_{xy}. \tag{13}$$

Условия пластичности примем в виде [6]

$$\sqrt{(\sigma_x^{(\alpha)} - \sigma_y^{(\alpha)})^2 + 4(\sigma_{xy}^{(\alpha)})^2} = 2\tau_0^{(\alpha)}, \quad (14)$$

а определяющие соотношения (2.22) – в виде

$$\frac{\sigma_x^{(\alpha)} - \sigma_y^{(\alpha)}}{2\sigma_{xy}^{(\alpha)}} = \frac{v_x^{(\alpha)} - v_y^{(\alpha)}}{v_{xy}^{(\alpha)}}. \quad (15)$$

Условия несжимаемости дают

$$v_x^{(\alpha)} + v_y^{(\alpha)} = 0. \quad (16)$$

Считая жёсткие плиты шероховатыми, запишем

$$\text{при } y \equiv (-1)^{(\alpha)} h^{(\alpha)}: \quad \sigma_{xy}^{(\alpha)} = -(-1)^{(\alpha)} \tau_0^{(\alpha)}. \quad (17)$$

Тогда принимая гипотезу Прандтля [7], что σ_{xy} зависит только от y , получим из (12) и (14):

$$\begin{aligned} \sigma_x^{(\alpha)} &= -Ax - C + 2\sqrt{(\tau_0^{(\alpha)})^2 - (Ax + B)^2}, \\ \sigma_y &= \sigma_y^{(1)} = \sigma_y^{(2)} = -C - Ax, \\ \sigma_{xy} &= \sigma_{xy}^{(1)} = \sigma_{xy}^{(2)} = Ay + B, \end{aligned} \quad (18)$$

где постоянные A и B определяются из граничных условий (17):

$$A = \frac{\tau_0^{(1)} + \tau_0^{(2)}}{h^{(1)} + h^{(2)}}, \quad B = \frac{\tau_0^{(1)}h^{(2)} - \tau_0^{(2)}h^{(1)}}{h^{(1)} + h^{(2)}}, \quad (19)$$

а постоянная C находится из интегрального условия

$$\begin{aligned} &\int_{-h^{(2)}}^0 \sigma_x^{(2)} \Big|_{x=\frac{1}{2}} + dy \int_0^{h^{(1)}} \sigma_x^{(1)} \Big|_{x=\frac{1}{2}} dy = 0. \\ C &= -\frac{Al}{2} + \left(\frac{1}{A(h^{(1)} + h^{(2)})} \right) \times \\ &\times \left\{ \frac{\pi}{2} \left[(\tau_0^{(1)})^2 + (\tau_0^{(2)})^2 \right] + B^2 \left[\sqrt{\left(\frac{\tau_0^{(2)}}{B} - 1 \right)} - \sqrt{\frac{\tau_0^{(1)}}{B} - 1} \right] + \right. \\ &\left. + (\tau_0^{(2)})^2 \arcsin \frac{B}{\tau_0^{(2)}} - (\tau_0^{(1)})^2 \arcsin \frac{B}{\tau_0^{(1)}} \right\}. \end{aligned} \quad (20)$$

Силу, действующую на слой, можно найти по формуле

$$\mathfrak{R} = 2 \int_0^l |\sigma_y| dx = 2l \left(C + A \frac{l}{2} \right). \quad (22)$$

Для построения кинематики (вектора скорости) воспользуемся соотношениями (15) и (16). Нетрудно видеть, что они будут удовлетворены, если положить

$$\left. \begin{aligned} v_x^{(\alpha)} &= C_1^{(\alpha)} + v \left[\frac{x}{h^{(\alpha)}} - 2 \sqrt{1 - \left(\frac{y}{h^{(\alpha)}} \right)^2} \right], \\ v_y^{(\alpha)} &= -\frac{vy}{h^{(\alpha)}} \end{aligned} \right\}, \quad (23)$$

где $v_1^{(\alpha)} = v_x^{(\alpha)}$, $v_2^{(\alpha)} = v_y^{(\alpha)}$, (24)

а v - заданная скорость сближения жёстких плит.

Постоянные $C_1^{(\alpha)}$ могут быть найдены из условия равенства потока материала, проходящего через сечение $x = 0$, количеству материала, выдавливаемого на длине l при сближении плит, т.е.

$$\left. \begin{aligned} - \int_0^{h^{(1)}} v_x^{(1)} dy &= \frac{l_0}{2} v \\ - \int_{-h^{(2)}}^0 v_x^{(1)} dy &= \frac{l_0}{2} v \end{aligned} \right\}. \quad (25)$$

Подставляя (23) в (25), получим

$$-C_1^{(1)} h^{(1)} + v \frac{l}{h^{(1)}} \left[y \sqrt{(h^{(1)})^2 - y^2} + (h^{(1)})^2 \arcsin \frac{y}{h^{(1)}} \right]_0^{h^{(1)}} = \frac{l_0}{2} v, \quad (26)$$

т.е.

$$\left. \begin{aligned} C_1^{(1)} &= \frac{v}{2} \left(\pi - \frac{l_0}{h^{(1)}} \right) \\ C_1^{(2)} &= \frac{v}{2} \left(\pi - \frac{l_0}{h^{(2)}} \right) \end{aligned} \right\}. \quad (27)$$

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (96-01-0084), а также Федеральной целевой программы "Интеграция" (проект №426).

Библиографический список

1. Победря Б.Е., Гузей И.Л. Математическое моделирование многокомпонентных деформируемых сред. // Сб. науч. тр. "Математическое моделирование систем и процессов". Пермь: Перм. гос. техн. ун-т, 1998, №6.
2. Победря Б.Е. Численные методы в теории упругости. - М.: Изд-во Моск. ун-та, 1985.
3. Победря Б.Е. Лекции по тензорному анализу. - М.: Изд-во Моск. ун-та, 1986.
4. Де Грот С., Мазур П. Неравновесная термодинамика. - М.: Мир, 1964.
5. Гиббс Дж.В. Термодинамические работы. - М.-Л.: Гостехиздат, 1950.
6. Ильюшин А.А. Пластичность (основы общей математической теории). - М.: Изд-во АН СССР, 1963.
7. Ильюшин А.А., Ленский В.С. Сопротивление материалов. - М.: Физматгиз, 1959.