

А. Л. Свистков

Институт механики сплошных сред УрО РАН

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ НА ВНУТРЕННИХ ПОВЕРХНОСТЯХ НАПОЛНЕННОГО ЭЛАСТОМЕРА

Abstract

Thermodynamic laws of mixture are used to obtain boundary conditions on the internal surfaces (interfaces) of a composite particulate material. A composite body consisting of several particulate fillers and an elastomeric binder is studied. The proposed model takes into account the diffusion of liquid and gas components dissolved in the binder, the existence of vacuoles in the vicinity of inclusions and microruptures in the binder.

Рассмотрим особенности математического моделирования изделий из композиционного материала с эластомерным связующим и зернистым наполнителем. В связующем могут присутствовать жидкие и газовые компоненты. Нас интересует граничные условия на внутренних поверхностях материала.

В используемых в промышленности эластомерах включения могут иметь очень малые размеры (до нескольких десятков ангстрем). Это означает необходимость учета сил поверхностного натяжения при моделировании полей напряжений около вакуолей (отслоений связующего от наполнителя). Испарение или выпотевание растворенных жидких и газовых компонентов в появившуюся вакуоль или микроразрыв требует анализа энергетических затрат на преодоление диффундирующим компонентом границы раздела фаз (теплоты испарения).

В данной статье поставлена цель выяснения возможного вида записи граничных условий на внутренних поверхностях композита допустимых с точки зрения законов термодинамики и требования инвариантности уравнений к выбору инерциальной системы отсчета. Полагается, что нам известны формулировки законов термодинамики для каждой фазы на структурном уровне материала и для всего изделия. Поэтому можно поставить вопрос. При каких условиях на внутренних границах раздела фаз (поверхностях частиц наполнителя, микроразрывов, вакуолей) используемые нами формулировки законов термодинамики для каждой фазы материала и для всего изделия согласуются друг с другом?

Используемые понятия

Для записи уравнений будем использовать следующие обозначения. Все характеристики эластомера будем отмечать индексом ноль. Параметры, характеризующие жидкие компоненты связующего (растворителя) будем отмечать индексами от единицы до N . Кроме того, материал содержит M деформируемых или абсолютно твердых наполнителей. Характеризующие их параметры будем отмечать

индексами от $N+1$ до $N+M$. Для анализа уравнений нам потребуется использование следующих понятий.

Поверхностным единичным тензором в точке с радиус-вектором \mathbf{x} поверхности S будем называть тензор, имеющий следующий вид

$$\overset{s}{\mathbf{I}}(\mathbf{x}) = \overset{s}{\mathbf{i}}_1(\mathbf{x})\overset{s}{\mathbf{i}}_1(\mathbf{x}) + \overset{s}{\mathbf{i}}_2(\mathbf{x})\overset{s}{\mathbf{i}}_2(\mathbf{x}),$$

где $\overset{s}{\mathbf{i}}_1, \overset{s}{\mathbf{i}}_2$ единичные взаимно ортогональные векторы, касательные к поверхности S в точке \mathbf{x} .

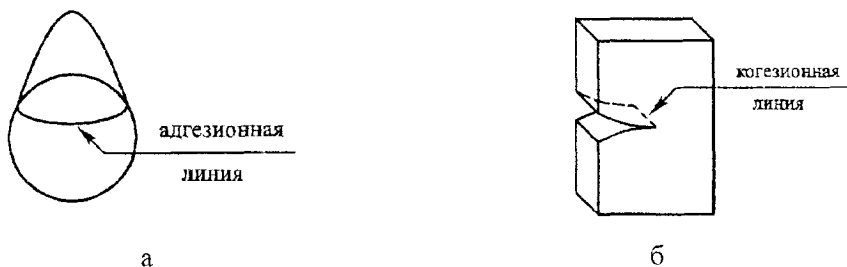


Рис. 1. Линии, ограничивающие внутренние поверхности в эластомерном композите: а – адгезионная линия в месте встречи отслоившейся матрицы с отслоенной и неотслоенной частями включения; б – когезионная линия в месте встречи берегов микроразрыва

Под производной по времени от скалярной величины α в момент времени t в точке поверхности S будем понимать величину $\left. \frac{\partial \alpha}{\partial t} \right|_x^s$ определяемую выражением

$$\left. \frac{\partial \alpha}{\partial t} \right|_x^s = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\alpha(t + \Delta t, \mathbf{x}(t + \Delta t, \mathbf{x})) - \alpha(t, \mathbf{x})}{\Delta t},$$

где \mathbf{x} — положение точки на поверхности S в момент времени t ; $\mathbf{x}(t + \Delta t, \mathbf{x})$ — радиус-вектор точки поверхности в момент времени $t + \Delta t$, положение которой в момент времени t определялось вектором \mathbf{x} .

Поверхностным набла-оператором $\overset{s}{\nabla}$ назовем оператор, определяемый равенством

$$\lim_{|\Delta \mathbf{x}| \rightarrow 0} \frac{\overset{m}{\Xi}(\Delta \mathbf{x} + \mathbf{x}) - \overset{m}{\Xi}(\mathbf{x}) - \Delta \mathbf{x} \cdot \overset{s}{\nabla} \overset{m}{\Xi}(\mathbf{x})}{|\Delta \mathbf{x}|} = 0,$$

справедливым для любой произвольной гладкой тензорной функции m -го ранга при условии, что векторы \mathbf{x} и $\Delta \mathbf{x} + \mathbf{x}$ лежат на рассматриваемой поверхности,

$$\mathbf{x} \in S, \quad \Delta \mathbf{x} + \mathbf{x} \in S.$$

Модуль тензора m -го ранга $\overset{m}{\Xi}$ для $m > 0$ вычисляется по формуле

$$\left| \overset{m}{\Xi} \right| = (\overset{m}{\Xi} \dots \overset{m}{\Xi})^{\frac{1}{2}}.$$

В круглых скобках стоит m -кратная свертка тензора $\overset{m}{\Xi}$ с самой собой. Модулем тензора нулевого ранга $\overset{0}{\Xi}$ (т. е. скалярной величины) является ее абсолютная величина.

Адгезионной линией будем называть геометрическое место точек, принадлежащее одновременно трем поверхностям раздела соприкасающихся в этих точках трех фаз (рис. 1, а).

В наполненных эластомерах такими линиями являются границы отслоенной и неслоенной частей поверхности частиц наполнителя при условии раскрытия вакуолей на их отслоенных частях под действием приложенной к материалу нагрузки.

Когезионной линией назовем геометрическое место точек на растущей поверхности разрыва материала, в которых происходит рост этого разрыва. Другими словами, это те точки поверхности разрушения, которые через любой сколь угодно малый промежуток времени раздвигаются и начинают принадлежать двум различным берегам растущего разрыва (рис. 1, б).

Скоростью движения \mathbf{v}_{L_A} адгезионной линии L_A в точке \mathbf{x}_{L_A} в момент времени t назовем вектор, определяемый условием

$$\mathbf{v}_{L_A}(t, \mathbf{x}_{L_A}) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\mathbf{x}_{L_A}(t + \Delta t) - \mathbf{x}_{L_A}}{\Delta t},$$

где под радиус-вектором $\mathbf{x}_{L_A}(t + \Delta t)$ понимается радиус-вектор точки адгезионной линии в момент времени $t + \Delta t$, наиболее близкой к точке \mathbf{x}_{L_A} .

$$\left| \mathbf{x}_{L_A}(t + \Delta t) - \mathbf{x}_{L_A} \right| = \min, \quad \mathbf{x}_{L_A}(t + \Delta t) \in L_A(t + \Delta t).$$

Скоростью движения \mathbf{v}_{L_C} когезионной линии L_C в точке \mathbf{x}_{L_C} в момент времени t назовем вектор, определяемый условием

$$\mathbf{v}_{L_C}(t, \mathbf{x}_{L_C}) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\mathbf{x}_{L_C}(t + \Delta t) - \mathbf{x}_{L_C}}{\Delta t},$$

где под радиус-вектором $\mathbf{x}_{L_C}(t + \Delta t)$ понимается радиус-вектор точки когезионной линии в момент времени $t + \Delta t$, наиболее близкой к точке \mathbf{x}_{L_C} .

$$\left| \mathbf{x}_{L_C}(t + \Delta t) - \mathbf{x}_{L_C} \right| = \min, \quad \mathbf{x}_{L_C}(t + \Delta t) \in L_C(t + \Delta t).$$

Будем считать, что первый и второй законы термодинамики смеси деформируемого и жидких континуумов имеют обычную форму записи для каждой фазы внутри рассматриваемого материала. При этом каких-то компонентов смеси в отдельных областях пространства может не быть. Так, например, деформируемый компонент смеси отсутствует в раскрывшейся вакуоли и внутри области микроразрыва связующего. Растворенных жидких компонентов может не быть внутри включений и т.д. Это не противоречит общему описанию. Просто плотность соответствующих компонентов смеси равна нулю. При этом под термином "жидкость" может пониматься и жидкость и газ. Кроме того, отметим следующее. В каждой фазе может содержаться не более одного деформируемого компонента смеси. В связующем содержится только эластомер. Каждое включение содержит только один упругий материал. В некоторых

фазах деформируемый компонент смеси отсутствует полностью (например, в вакуолях и микроразрывах).

Формулировка первого закона термодинамики изделия из композитного материала

Проинтегрируем по объему V_C изделия из композитного материала первый закон термодинамики, сформулированный в дифференциальной форме в актуальной конфигурации для смеси континуумов [1–3]. Используя обозначение ψ_i для суммы объемных плотностей в актуальной конфигурации внутренней и кинетической энергии i -го компонента смеси

$$\psi_i = \rho_i e_i + \frac{1}{2} \rho_i (\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{v}_i)$$

и теорему Остроградского – Гаусса, получим равенство

$$J = \int_{V_C} \frac{\partial}{\partial t} \left(\sum_{i=0}^{N+M} \psi_i \right) dV_C + \int_{S_C} \mathbf{n} \cdot \sum_{i=0}^{N+M} \psi_i \mathbf{v}_i dS_C + \int_{S_C} \mathbf{n} \cdot \sum_{i=0}^{N+M} (\psi_i \mathbf{v}_i - \bar{\psi}_i \bar{\mathbf{v}}_i) d\bar{S} - \int_{S_f} \mathbf{n} \cdot \sum_{i=0}^{N+M} \mathbf{T}_i \cdot \mathbf{v}_i dS_C = \int_{\bar{S}} \mathbf{n} \cdot \sum_{i=0}^{N+M} (\mathbf{T}_i \cdot \mathbf{v}_i - \bar{\mathbf{T}}_i \cdot \bar{\mathbf{v}}_i) d\bar{S} + \int_{S_C} \mathbf{n} \cdot \mathbf{h} dS_C + \int_{s_C} \mathbf{n} \cdot (\mathbf{h} - \bar{\mathbf{h}}) d\bar{S} = 0, \quad (1)$$

где S_C – внешняя граница изделия; \bar{S} – внутренние поверхности раздела фаз; \mathbf{n} – нормаль к поверхности S ; ρ_i – объемная плотность i -го континуума; e_i – массовая плотность внутренней энергии i -го компонента среды; \mathbf{T}_i – тензор истинных напряжений действующих на i -й компонент (тензор напряжений Коши i -го компонента); \mathbf{h} – вектор теплового потока. Надчерк над параметрами состояния среды (такими, как $\bar{\psi}_i, \bar{\mathbf{T}}_i, \bar{\mathbf{v}}_i, \bar{\mathbf{h}}$) означает, что соответствующие параметры состояния берутся на границе раздела со стороны фазы, для которой нормаль \mathbf{n} является внутренней. Отсутствие надчерка над параметрами состояния смеси говорит о том, что на границе раздела они берутся со стороны фазы, для которой нормаль \mathbf{n} является внешней.

Закон сохранения энергии, записанный в виде (1), является следствием дифференциальной формулировки первого закона термодинамики для смеси континуумов. Его требуется дополнить граничными условиями на поверхностях раздела фаз, которые следует аккуратно определить. Попробуем сформулировать такие условия на внутренних границах раздела фаз, при которых выражение (1) было бы эквивалентно следующей гипотезе (эмпирической формулировке закона сохранения энергии композитного изделия).

ГИПОТЕЗА ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО БАЛАНСА. Будем считать, что для рассматриваемого изделия из композитного материала справедлив первый закон термодинамики, сформулированный в виде равенства

$$J_V + J_S + J_A + J_C = 0, \quad (2)$$

в котором преобразование энергии в объеме изделия V_C и на его внешней границе S_C определяется условием

$$J_V = \frac{\partial}{\partial t} \left(\int_{V_C} \sum_{I=0}^{M+N} \psi_I dV_C \right) + \int_{S_C} \mathbf{n} \cdot \left(\int_{V_C} \sum_{I=0}^{M+N} \psi_I (\mathbf{v}_I - \mathbf{v}) dS_C \right) - \int_{S_C} \mathbf{n} \cdot \sum_{I=0}^{M+N} \mathbf{T}_I \cdot \mathbf{v}_I dS_C + \int_{S_C} \mathbf{n} \cdot \mathbf{h} dS_C, \quad (3)$$

на внутренних поверхностях изделия \bar{S} учитывается с помощью выражения

$$J_S = \int_{\bar{S}} \left(\frac{\partial e}{\partial t} + e \nabla \cdot \mathbf{v} \right) d\bar{S},$$

на адгезионных линиях с помощью зависимости

$$J_A = \int_{L_A} \left(e_a \mathbf{n}_a \cdot (\mathbf{v}_{L_A} - \mathbf{v}_a) + e_b \mathbf{n}_b \cdot (\mathbf{v}_{L_A} - \mathbf{v}_b) + e_c \mathbf{n}_c \cdot (\mathbf{v}_{L_A} - \mathbf{v}_c) \right) dL_A$$

и на когезионных линиях условием

$$J_C = \int_{L_C} \left(e_a \mathbf{n}_a \cdot (\mathbf{v}_{L_C} - \mathbf{v}_a) + e_b \mathbf{n}_b \cdot (\mathbf{v}_{L_C} - \mathbf{v}_b) \right) dL_C.$$

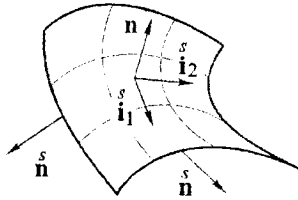


Рис. 2. Векторы, характеризующие внутреннюю поверхность композита: \mathbf{n} – единичный вектор нормали к поверхности; $\mathbf{i}_1, \mathbf{i}_2$ – единичные ортогональные касательные векторы; $\bar{\mathbf{n}}$ – единичный вектор нормали к границе поверхности, лежащей в ее касательной плоскости

Рассмотрим его физический смысл. Выражение J_V необходимо для моделирования процессов в произвольных точках объема изделия и учета внешнего воздействия на него. Оно содержит слагаемые, определяющие скорость изменения внутренних и кинетических энергий компонентов смеси во всем изделии, работу внешних сил и тепло - массообмен с окружающей средой.

Выражение J_S описывает изменение поверхностной энергии на внутренних границах раздела фаз. Оно определяет изменение поверхностной энергии за счет изменения состояния системы $\frac{\partial e}{\partial t}$ и за счет роста (или убывания) размеров границы раздела фаз $e \nabla \cdot \mathbf{v}$. Скорость движения поверхности раздела \mathbf{v} в каждом конкретном случае должна определяться самостоятельно. На границе раздела жидкой и газообразной фазы ее разумно связать с движением жидкой фазы, на границе

деформируемой и жидкой - с деформируемой, на границе твердого включения - с поверхностью этого включения. При этом в каждой фазе может присутствовать только один деформируемый компонент или не содержаться ни одного (когда фаза представляет собой смесь только жидкостей или газов).

На адгезионных линиях встречаются одновременно три границы раздела фаз (поверхности A , B и C). Здесь может происходить рост или убывание каждой из этих границ и вызывать соответствующий рост или убывание энергии материала. В дальнейшем величины, определяющие параметры состояния первой границы раздела фаз, мы будем сопровождать индексом a , второй - индексом b , третьей - индексом c .

Символами $\overset{s}{\mathbf{n}}_a$, $\overset{s}{\mathbf{n}}_b$, $\overset{s}{\mathbf{n}}_c$ обозначены векторы: 1) перпендикулярные к касательному вектору адгезионной линии L_A ; 2) являющиеся внешними по отношению к ним; 3) касательные соответствующим поверхностям A , B или C . С точки зрения двумерной геометрии, это внешние нормали на рассматриваемой поверхности к линии, ограничивающие эту поверхность (рис. 2).

Скорость увеличения границы раздела фаз, приходящаяся на элемент длины dL_A адгезионной линии, определяется проекцией на направление возможного роста (или убывания) этой границы разности скорости движения адгезионной линии и скорости движения точек соответствующей границы раздела фаз $\overset{s}{\mathbf{n}} \cdot \left(\mathbf{v}_{L_A} - \mathbf{v} \right)$.

Нижние индексы a , b или c у величин $\overset{s}{\mathbf{n}}$, $\overset{s}{\mathbf{v}}$ ставятся в соответствии с тем, какой поверхности A , B или C они принадлежат. Выражение J_A учитывает в законе сохранения энергии (2) изменения, связанные с ростом или убыванием поверхностей на адгезионных линиях.

Аналогичным образом определяются особенности изменения энергии системы на когезионных линиях. Отличие состоит только в том, что на когезионных линиях встречаются два берега растущего разрыва (назовем их поверхностями A и B). Соответствующий вклад процессов на когезионных линиях в изменении состояния материала фиксирует выражение J_C .

ГИПОТЕЗА ЭКВИВАЛЕНТНОСТИ ФОРМУЛИРОВОК ПЕРВОГО ЗАКОНА ТЕРМОДИНАМИКИ. Полагаем, что закон сохранения энергии, сформулированный для совокупности всех фаз, образующих изделие (1), должен быть полностью эквивалентен закону сохранения энергии в рассматриваемом изделии (2):

$$J = J_V + J_S + J_A + J_C.$$

Нас интересуют только локальные среды, т. е. среды, по отношению к которым справедливо следующее предположение.

ГИПОТЕЗА ЛОКАЛЬНОСТИ ПРОЦЕССОВ В МАТЕРИАЛЕ. Полагаем, что все процессы в композитном материале в любой момент времени в любой его точке определяются параметрами состояния в ней в данный момент времени и не зависят от значений параметров состояния в других точках. Поэтому система определяющих уравнений в точках, находящихся в объемах фаз композитного материала, на границах раздела фаз, на адгезионных и когезионных линиях, должна связывать с помощью дифференциальных уравнений и дифференциальных неравенств параметры состояния и их производные только соответственно в рассматриваемых точках внутри объемов фаз, на поверхностях раздела фаз, на адгезионных и когезионных линиях материала.

Можно показать, что на основе сделанных предположений связь (2) представляется в виде равенств для адгезионных линий:

$$e_a \mathbf{n}_a \cdot \left(\mathbf{v}_{L_a} - \mathbf{v}_a \right) + e_b \mathbf{n}_b \cdot \left(\mathbf{v}_{L_a} - \mathbf{v}_b \right) + e_c \mathbf{n}_c \cdot \left(\mathbf{v}_{L_a} - \mathbf{v}_c \right) + \beta_a \mathbf{n}_a \cdot \mathbf{v}_a +$$

$$+ \beta_b \mathbf{n}_b \cdot \mathbf{v}_b + \beta_c \mathbf{n}_c \cdot \mathbf{v}_c + \mathbf{n}_a \cdot \Psi_a \cdot \mathbf{v}_a + \mathbf{n}_b \cdot \Psi_b \cdot \mathbf{v}_b + \mathbf{n}_c \cdot \Psi_c \cdot \mathbf{v}_c = 0, \quad (4)$$

когезионных линий:

$$e_a \mathbf{n}_a \cdot \left(\mathbf{v}_{L_c} - \mathbf{v}_a \right) + e_b \mathbf{n}_b \cdot \left(\mathbf{v}_{L_c} - \mathbf{v}_b \right) + \beta_a \mathbf{n}_a \cdot \mathbf{v}_a + \beta_b \mathbf{n}_b \cdot \mathbf{v}_b +$$

$$+ \mathbf{n}_a \cdot \Psi_a \cdot \mathbf{v}_a + \mathbf{n}_b \cdot \Psi_b \cdot \mathbf{v}_b = 0, \quad (5)$$

а также для внутренних поверхностей:

$$\frac{\partial e}{\partial t} \Big|_{\mathbf{x}} + e \nabla \cdot \mathbf{v} + \nabla \cdot \left(\beta \mathbf{I} \right) \cdot \mathbf{v} + \beta \mathbf{I} \cdot \left(\nabla \mathbf{v} \right)^T + \Psi \cdot \left(\nabla \mathbf{v} \right)^T -$$

$$- \left(\nabla \cdot \Psi \right) \cdot \mathbf{v} - \mathbf{n} \cdot \sum_{i=0}^{N+M} \left(\psi_i \left(\mathbf{v}_i - \mathbf{v} \right) - \bar{\psi}_i \left(\bar{\mathbf{v}}_i - \mathbf{v} \right) \right) +$$

$$+ \mathbf{n} \cdot \sum_{i=0}^{N+M} \left(\mathbf{T}_i \cdot \mathbf{v}_i - \bar{\mathbf{T}}_i \cdot \bar{\mathbf{v}}_i \right) - \mathbf{n} \cdot \left(\mathbf{h} - \bar{\mathbf{h}} \right) = 0, \quad (6)$$

где β , Ψ — некоторая дифференцируемая скалярная и тензорная функции на внутренних поверхностях композита, с точностью до которых удастся разделить условия на поверхности и ограничивающей ее линии.

Формулировка второго закона термодинамики изделия из композитного материала

При анализе второго закона термодинамики поступим аналогичным образом. Проинтегрируем запись второго закона термодинамики, сформулированного для каждой фазы композитного материала [1 – 3] по объему изделия, и преобразуем полученное выражение с помощью теоремы Гаусса – Остроградского:

$$J^1 = \int_{V_c} \frac{\partial}{\partial t} \left(\sum_{i=0}^{N+M} \rho_i s_i \right) dV_c + \int_{S_c} \mathbf{n} \cdot \left(\sum_{i=0}^{N+M} \rho_i s_i \right) dS_c +$$

$$+ \int_{\bar{S}} \mathbf{n} \cdot \sum_{i=0}^{N+M} \left(\rho_i s_i \mathbf{v}_i - \bar{\rho}_i \bar{s}_i \bar{\mathbf{v}}_i \right) d\bar{S} + \int_{S_c} \mathbf{n} \cdot \left(\frac{\mathbf{h}}{\theta} \right) dS_c +$$

$$+ \int_{\bar{S}} \mathbf{n} \cdot \left(\frac{\mathbf{h}}{\theta} - \bar{\frac{\mathbf{h}}{\theta}} \right) d\bar{S} \geq 0,$$

где s_i – массовая плотность энтропии i -го компонента среды. Записанный в таком виде второй закон термодинамики является следствием выполнения неравенства Клаузиуса – Дюгема смеси деформируемого и жидких континуумов в каждой составляющей композит фазе. Но мы хотим, чтобы он имел вид следующего ограничения.

ГИПОТЕЗА ЭНТРОПИЙНОГО БАЛАНСА. Будем считать, что для рассматриваемого изделия из композитного материала справедлив второй закон термодинамики, сформулированный в виде неравенства

$$J_V^+ + J_S^+ + J_A^+ + J_C^+ \geq 0,$$

в котором изменение энтропии в объеме изделия V_C и на его внешней границе S_C определяется условием

$$J_V^+ = \frac{\partial}{\partial t} \left(\int_{V_C} \left(\sum_{i=0}^{N+M} \rho_i s_i \right) \partial V_C \right) + \int_{S_C} \mathbf{n} \cdot \left(\sum_{i=0}^{N+M} \rho_i s_i \left(\mathbf{v}_i - \mathbf{v} \right) \right) dS_C + \int_{S_C} \mathbf{n} \cdot \left(\frac{\mathbf{h}}{\theta} \right) dS_C,$$

на внутренних поверхностях изделия \bar{S} учитывается с помощью выражения

$$J_S^+ = \int_{\bar{S}} \left[\frac{\partial s}{\partial t} + s \nabla \cdot \mathbf{v} \right] d\bar{S},$$

на адгезионных линиях с помощью зависимости

$$J_A^+ = \int_{L_A} \left(s_a \mathbf{n}_a \cdot \left(\mathbf{v}_{L_A} - \mathbf{v}_a \right) + s_b \mathbf{n}_b \cdot \left(\mathbf{v}_{L_A} - \mathbf{v}_b \right) + s_c \mathbf{n}_c \cdot \left(\mathbf{v}_{L_A} - \mathbf{v}_c \right) \right) dL_A,$$

и на когезионных линиях условием

$$J_C^+ = \int_{L_C} \left(s_a \mathbf{n}_a \cdot \left(\mathbf{v}_{L_A} - \mathbf{v}_a \right) + s_b \mathbf{n}_b \cdot \left(\mathbf{v}_{L_A} - \mathbf{v}_b \right) \right) dL_C.$$

Как и в случае формулировки первого закона термодинамики композитного изделия, выражение J_V^+ необходимо для моделирования процессов в произвольных точках его объема и учета внешних воздействий на рассматриваемое тело. Оно содержит слагаемые, определяющие скорость изменения энтропий компонентов смеси во всем изделии и учитывает тепло-массообмен с окружающей средой.

Выражение J_S^+ учитывает изменение энтропии изделия в результате изменения значений поверхностных энтропий на внутренних границах раздела фаз и за счет изменения размеров этих границ. Рост или убывание внутренних поверхностей на адгезионных и когезионных линиях принимается во внимание с помощью слагаемых J_A^+ и J_C^+ .

С целью получения необходимых следствий используем следующее предположение. Суть его сводится к утверждению, что в композитном изделии возможно необратимое рассеивание энергии на границах раздела фаз, а также на адгезионных и когезионных линиях материала. Формулируется это в виде следующего ограничения.

ГИПОТЕЗА ЭНТРОПИЙНОГО СООТВЕТСТВИЯ ФОРМУЛИРОВОК ВТОРОГО ЗАКОНА ТЕРМОДИНАМИКИ. Полагаем, что рост общей энтропии изделия равен или больше роста, определяемого с помощью формулировки второго закона термодинамики отдельных фаз материала. Дополнительный рост энтропии возможен за счет диссипационных процессов на границах фаз, адгезионных и когезионных линиях материала, которые не учитываются при простом суммировании интегральных уравнений баланса энтропии всех фаз.

$$J_V^+ + J_S^+ + J_A^+ + J_C^+ \geq J^+. \tag{7}$$

Используя гипотезу локальности, можно показать, что из условия (7) следуют ограничения на особенности протекания процессов в материале на адгезионных линиях:

$$\begin{aligned}
 & s_a^s \mathbf{n}_a \cdot \left(\mathbf{v}_{L_A} - \mathbf{v}_a \right) + s_b^s \mathbf{n}_b \cdot \left(\mathbf{v}_{L_A} - \mathbf{v}_b \right) + s_c^s \mathbf{n}_c \cdot \left(\mathbf{v}_{L_A} - \mathbf{v}_c \right) + \\
 & + \gamma_a^s \mathbf{n}_a \cdot \mathbf{v}_a + \gamma_b^s \mathbf{n}_b \cdot \mathbf{v}_b + \gamma_c^s \mathbf{n}_c \cdot \mathbf{v}_c + \\
 & + \mathbf{n}_a \cdot \mathbf{Y}_a \cdot \mathbf{v} + \mathbf{n}_b \cdot \mathbf{Y}_b \cdot \mathbf{v} + \mathbf{n}_c \cdot \mathbf{Y}_c \cdot \mathbf{v} \geq 0,
 \end{aligned} \tag{8}$$

когезионных линиях

$$\begin{aligned}
 & s_a^s \mathbf{n}_a \cdot \left(\mathbf{v}_{L_C} - \mathbf{v}_a \right) + s_b^s \mathbf{n}_b \cdot \left(\mathbf{v}_{L_C} - \mathbf{v}_b \right) + \gamma_a^s \mathbf{n}_a \cdot \mathbf{v}_a + \gamma_b^s \mathbf{n}_b \cdot \mathbf{v}_b + \\
 & + \mathbf{n}_a \cdot \mathbf{Y}_a \cdot \mathbf{v} + \mathbf{n}_b \cdot \mathbf{Y}_b \cdot \mathbf{v} \geq 0,
 \end{aligned} \tag{9}$$

а на внутренних поверхностях

$$\begin{aligned}
 & \left. \frac{\partial s}{\partial t} \right|_{\mathbf{x}_e} + s^s \nabla \cdot \mathbf{v} + \nabla \cdot \left(\gamma \mathbf{I} \right) \cdot \mathbf{v} + \gamma \mathbf{I} \cdot \left(\nabla \mathbf{v} \right)^T + \mathbf{Y} \cdot \left(\nabla \mathbf{v} \right)^T + \\
 & - \left(\nabla \cdot \mathbf{Y} \right) \cdot \mathbf{v} - \mathbf{n} \cdot \sum_{i=0}^{N+M} \left(\rho_i s_i \left(\mathbf{v}_i - \mathbf{v} \right) - \bar{\rho}_i \bar{s}_i \left(\bar{\mathbf{v}}_i - \mathbf{v} \right) \right) - \\
 & - \mathbf{n} \cdot \left(\frac{\mathbf{h}}{\theta} - \bar{\frac{\mathbf{h}}{\theta}} \right) \geq 0,
 \end{aligned} \tag{10}$$

где γ , \mathbf{Y} — некоторые дифференцируемые скалярная и тензорная функции на внутренней поверхности композита, с точностью до которой удается разделить условия на внутренней поверхности и ограничивающей ее линии.

Следствия из законов термодинамики

Граничные условия не должны зависеть от выбора инерциальной системы отсчета. Анализ вытекающих следствий из этого требования осуществим с помощью стандартных приемов исследования. Ограничимся рассмотрением конкретной модели материала. Будем использовать для скалярных β , γ и тензорных Ψ , \mathbf{Y} параметров следующие выражения:

$$\beta = -f, \quad \gamma = 0, \quad \Psi = -2\eta \mathbf{D}, \quad \mathbf{Y} = 0, \quad \eta \geq 0,$$

где

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2} \left(\nabla \mathbf{v} + \left(\nabla \mathbf{v} \right)^T \right).$$

Под параметром f понимается поверхностная плотность свободной энергии, определяемая выражением

$$f = e - \theta s.$$

Будем считать, что она связана с поверхностной энтропией отношением

$$s = -\frac{\partial f}{\partial \theta}$$

и является функцией температуры

$$f = f(\theta).$$

Из сделанных уточнений и требования выполнения условий (4) – (5) и (8) – (9) в любой инерциальной системе отсчета вытекает ряд следствий.

Условия на адгезионных и когезионных линиях

Действующие на внутренних границах материала поверхностные напряжения

$$\mathbf{T} = \mathbf{T}^e + \mathbf{T}^d$$

представляют собой сумму равновесной \mathbf{T}^e и диссипативной \mathbf{T}^d составляющих,

$$\mathbf{T}^e = f \mathbf{I}, \quad \mathbf{T}^d = 2 \eta \mathbf{D}.$$

Сумма сил поверхностного натяжения встречающихся поверхностей раздела фаз на адгезионных линиях равна нулю,

$$\mathbf{n}_a \cdot \mathbf{T}_a + \mathbf{n}_b \cdot \mathbf{T}_b + \mathbf{n}_c \cdot \mathbf{T}_c = 0, \tag{11}$$

Работа сил поверхностного натяжения переходит в изменение поверхностной энергии фазовых границ,

$$e_a \mathbf{n}_a \cdot (\mathbf{v}_{L_A} - \mathbf{v}_a) + e_b \mathbf{n}_b \cdot (\mathbf{v}_{L_A} - \mathbf{v}_b) + e_c \mathbf{n}_c \cdot (\mathbf{v}_{L_A} - \mathbf{v}_c) - \\ - \mathbf{n}_a \cdot \mathbf{T}_a \cdot (\mathbf{v}_a - \mathbf{v}_{L_A}) - \mathbf{n}_b \cdot \mathbf{T}_b \cdot (\mathbf{v}_b - \mathbf{v}_{L_A}) - \mathbf{n}_c \cdot \mathbf{T}_c \cdot (\mathbf{v}_c - \mathbf{v}_{L_A}) = 0.$$

Общее изменение энтропии системы при движении адгезионной линии не может идти в сторону ее убывания,

$$s_a \mathbf{n}_a \cdot (\mathbf{v}_{L_A} - \mathbf{v}_a) + s_b \mathbf{n}_b \cdot (\mathbf{v}_{L_A} - \mathbf{v}_b) + s_c \mathbf{n}_c \cdot (\mathbf{v}_{L_A} - \mathbf{v}_c) \geq 0.$$

Аналогичный физический смысл имеют уравнения на когезионных линиях. Формулируются они в виде равенства нулю суммы сил поверхностного натяжения:

$$\mathbf{n}_a \cdot \mathbf{T}_a + \mathbf{n}_a \cdot \mathbf{T}_b = 0,$$

энергетического

$$e_a \mathbf{n}_a \cdot (\mathbf{v}_{L_C} - \mathbf{v}_a) + e_b \mathbf{n}_b \cdot (\mathbf{v}_{L_C} - \mathbf{v}_b) - \\ - \mathbf{n}_a \cdot \mathbf{T}_a \cdot (\mathbf{v}_a - \mathbf{v}_{L_C}) - \mathbf{n}_b \cdot \mathbf{T}_b \cdot (\mathbf{v}_b - \mathbf{v}_{L_C}) = 0,$$

и энтропийного баланса

$$s_a \mathbf{n}_a \cdot (\mathbf{v}_{Lc} - \mathbf{v}_a) + s_b \mathbf{n}_b \cdot (\mathbf{v}_{Lc} - \mathbf{v}_b) \geq 0.$$

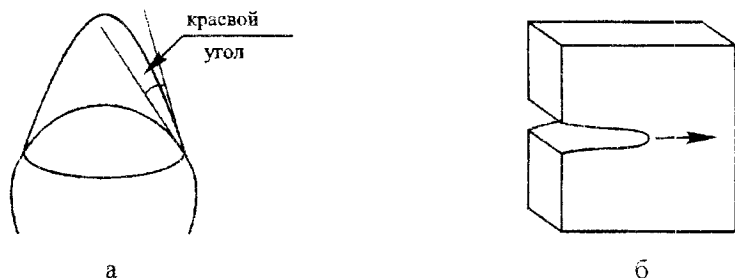


Рис. 3. Особенности встречи поверхностей раздела фаз на адгезионных и когезионных линиях: а – формирование краевого угла в месте встречи поверхностей на адгезионной линии; б – отсутствие острого угла в месте встречи берегов микроразрыва при симметричном их росте и при условии равенства нулю диссипативной части тензора поверхностного напряжения

Требование удовлетворения на адгезионной линии равенства (11) означает требование формирования краевого угла в месте встречи поверхностей раздела фаз. величина которого определяется значениями тензоров поверхностного натяжения (рис. 3, а) и отсутствие острого угла в вершине трещины при симметричном ее росте (рис. 3, б).

Условия на границах раздела фаз

Будем полагать, что на границах соприкасающихся фаз не может происходить скачка температур. Всюду на внутренних поверхностях композитного материала выполняется равенство

$$\bar{\theta} = \theta.$$

Кроме того, считаем, что для деформируемых компонентов смеси разрешено только движение по ее границе или происходит полного прилипания,

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{v}_i = \mathbf{n} \cdot \mathbf{v},$$

где $i = 0, N + 1, \dots, N + M$.

Из требования выполнения условий (6) и (10) в любой инерциальной системе отсчета вытекают следствия. В материале должно осуществляться равенство нормальных составляющих потоков массы компонентов к поверхности раздела соприкасающихся фаз.

$$\rho_i \mathbf{n} \cdot (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}) = \bar{\rho}_i \mathbf{n} \cdot (\bar{\mathbf{v}}_i - \mathbf{v}).$$

Изменение импульсов компонентов материала при переходе через поверхность раздела соприкасающихся фаз определяется влиянием поверхностных напряжений $\hat{\mathbf{T}}^s$.

кривизной границы и разностью между силами $\mathbf{n} \cdot \bar{\mathbf{T}}$ и $\mathbf{n} \cdot \mathbf{T}$, действующими со стороны контактирующих фаз.

$$\sum_{i=0}^{N+M} \left(\mathbf{n} \cdot \rho_i \left(\mathbf{v}_i - \bar{\mathbf{v}} \right) \right) (\mathbf{v}_i - \bar{\mathbf{v}}) = \mathbf{n} \cdot (\mathbf{T} - \bar{\mathbf{T}}) - \bar{\nabla} \cdot \bar{\mathbf{T}}.$$

Изменение кинетической энергии и химического потенциала при движении диффундирующих компонентов ($i = 1, \dots, N$) через поверхность раздела фаз регулируется функциями проницаемости η_i^s ,

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \left(\mathbf{v}_i - \bar{\mathbf{v}} \right) \cdot \left(\mathbf{v}_i - \bar{\mathbf{v}} \right) - \frac{1}{2} \left(\bar{\mathbf{v}}_i - \bar{\mathbf{v}} \right) \cdot \left(\bar{\mathbf{v}}_i - \bar{\mathbf{v}} \right) + \frac{(\mu_i - \bar{\mu}_i)}{m_i^o} = \\ = \eta_i^s \mathbf{n} \cdot \left(\mathbf{v}_i - \bar{\mathbf{v}} \right), \quad \eta_i^s \geq 0, \quad i = 1, \dots, N. \end{aligned}$$

Скорость изменения поверхностной энтропии и скачок энтропии диффундирующих компонентов на границах раздела фаз композитного материала определяются скачком теплового потока и диссипативными поверхностными процессами (необратимыми потерями при движении через границу потоков диффундирующих компонентов, вязкостью поверхности при изменении ее формы, скольжением связующего по частицам наполнителя).

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N \left(\mathbf{n} \cdot \rho_i \left(\mathbf{v}_i - \bar{\mathbf{v}} \right) \right) \theta (\bar{s}_i - s_i) + \theta \frac{\partial s}{\partial t} \Bigg|_s^s + \theta s^s \bar{\nabla} \cdot \bar{\mathbf{v}} = \\ = \mathbf{n} \cdot (\mathbf{h} - \bar{\mathbf{h}}) + \sum_{i=1}^N \eta_i^s \rho_i \left(\mathbf{n} \cdot \left(\mathbf{v}_i - \bar{\mathbf{v}} \right) \right)^2 + \left(2 \eta^s \mathbf{D} \right) \cdot \left(\bar{\nabla} \bar{\mathbf{v}} \right)^T + \\ + \eta_f^s (\mathbf{n} \cdot \mathbf{T}_0 - (\mathbf{n} \cdot \mathbf{T}_0 \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n}) \cdot (\mathbf{n} \cdot \mathbf{T}_0 - (\mathbf{n} \cdot \mathbf{T}_0 \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n}). \end{aligned}$$

В эластомерном композите касательная составляющая поверхностной силы на границе связующего с наполнителем связана с помощью функции скольжения с относительной скоростью движения эластомера по поверхности включения.

$$\mathbf{v}_0 - \bar{\mathbf{v}} = - (\mathbf{n} \cdot \mathbf{T}_0 - (\mathbf{n} \cdot \mathbf{T}_0 \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n}), \quad \eta_f^s \geq 0.$$

Неопределенными в модели остались только скорости движения адгезионных \mathbf{v}_{L_A} и когезионных \mathbf{v}_{L_C} линий. Для их задания необходим анализ особенностей разрушения композита.

Выводы

1. Требование эквивалентности эмпирических формулировок законов термодинамики для всего композитного изделия и формулировок, выведенных из законов термодинамики для составляющих его фаз, позволяет получить граничные условия для внутренних поверхностей раздела фаз на структурном уровне композитного изделия. В уравнениях учитывается действие сил поверхностного

натяжения, скачки теплового потока, импульсов и кинетической энергии движения диффундирующих компонентов.

2. Для строгого учета явлений на границах раздела фаз композитного материала необходимо принимать во внимание условия на ограничивающих их адгезионных и когезионных линиях.

Библиографический список

1. Crochet M. J., Naghdi P. M. On constitutive equations for flow of fluid through an elastic solid // *Int. J. Eng. Sci.* - 1966. - Vol. 4, N. 4. - P. 383–401.
2. Green A. E., Naghdi P. M. A dynamical theory of interacting continua // *Int. J. Eng. Sci.* - 1965. - Vol. 3, N. 2. - P. 231–241.
3. Green A. E., Steel T. R. Constitutive equations for interacting continua // *Int. J. Eng. Sci.* - 1966. - Vol. 4, N. 4. - P. 483–500.

Получено 1.03.2001