ЭЛЕМЕНТНАЯ БАЗА МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ТВЕРДОГО ДЕФОРМИРУЕМОГО ТЕЛА.

Степаненко Ю.П. НИИ механики и прикладной математики.

1. Введение.

Реальное твердое деформируемое тело (ТДТ) – это конечное множество элементов: атомов, молекул, молекулярных образований и, наконец, тел-компонентов. В теоретическом представлении ТДТ – это сплошная среда, т.е. континуальное множество элементов: частиц, материальных точек, «тел-точек» и т.п. Математическая модель ТДТ представляется в терминах механики сплошной среды; но «технология» ее построения использует все, что хоть как-то проясняет суть исследуемого явления. Это «все» и есть элементная база математической модели ТДТ. Здесь уместно вспомнить, что элементная база уравнений Максвелла заимствована из гидромеханики; ток смещения – это уже инородное добавление.

Следующий вводный пример призван как-то легализовать приемы конструктивного построения математической модели ТДТ. В механике сплошной среды линейное упругое тело наделено свойством термического расширения, но в природе нет механизмов, реализующих это свойство. Физика твердого тела [1] связывает термическое расширение ТДТ с асимметрией «потенциальных ям» самосогласованного поля, в которых находятся атомы ТДТ. Для линейного ТДТ эта асимметрия отсутствует; следовательно, отсутствует и термическое расширение. Отсюда нетрудно прийти к пониманию того, что свободные колебания изолированного л и н е й н о г о ТДТ являются незатухающими, а свободные колебания изолированного н е л и н е й н о г о ТДТ затухают [2].

2. Уравнения состояния ТДТ.

На микроуровне ТДТ представляется системой упругих тел, движение которых стеснено силами вязкого сопротивления. Силы вязкого сопротивления не имеют материального носителя, т.е. с ними не связана ни масса, ни теплоемкость, ни термическое сопротивление. Каждое упругое тело в любой момент времени находится в равновесном состоянии, которое характеризуется (в термодинамическом смысле [3]) двумя потенциалами: внутренней энергией u_i и энтропией s_i.

$$du_i = \delta a_i + \delta q_i, \quad ds_i = \delta q_i / T, \tag{1}$$

где δa_i и δq_i - вариации работы и тепла, сообщенные i-тому телу, T – абсолютная температура. Температура всех тел системы одинакова. Посредством преобразования Лежандра вводится потенциал свободной энергии.

$$df_i = du_i - d(s_i T) = \delta a_i - s_i \delta T \tag{2}$$

Упомянутые потенциалы аддитивным образом входят в соответствующие потенциалы системы:

$$U = \sum_i u_i, \qquad S = \sum_i s_i, \qquad F = \sum_i f_i \tag{3}$$

При этом предполагается, что конфигурационная составляющая энтропии системы отсутствует. Таким образом, локально равновесная система упругих тел в целом является неравновесной и способна к производству энтропии за счет сил вязкого сопротивления. В ТДТ производство энтропии осуществляется еще и за счет теплопроводности.

Помимо термодинамического аспекта описания состояния системы существует и математический аспект [4]. В плане последнего состояние системы во времени t характеризуется вектор-функцией состояния $\eta(t)$, компоненты которой суть деформации упругих тел. Напряжение $\sigma(t)$, действующее в элементарном объеме ТДТ, и температура этого объема $T(t)$ - это компоненты входной вектор-функции $x(t)$. Выходная вектор-функция $y(t)$ представляет деформацию упомянутого элементарного объема. В этом случае

$$\frac{d}{dt}\eta(t) = X(\eta(t), x(t)), \quad t \geq 0, \quad \eta(0) = \eta_0 \qquad (4).$$
$$y(t) = Y(\eta(t), x(t))$$

3. Характеристика основных элементов математической модели ТДТ.

Как это следует из предшествующего раздела, основными элементами математической модели ТДТ являются упругие тела, движение которых стеснено силами вязкого сопротивления. В натуральном состоянии, которое отнесено к температуре $0^\circ K$, все тела одинаковы и характеризуются плотностью $\rho_\circ$. Структурные давления P_ρ порождают дисперсию плотности ρ. Функция распределения $\chi = \chi(\rho)$ также отнесена к $0^\circ K$. Напряженное состояние основного элемента представлено тензором напряжения Коши:

$$\underline{\underline{H}} = P\underline{\underline{E}} + \underline{\underline{\Pi}}, \tag{5}$$

где $\underline{\underline{E}}$ - единичный тензор, $\underline{\underline{\Pi}} = dev\underline{\underline{H}}$. Напряжение $\underline{\underline{H}}$ с точностью до напряжений, порождаемых силами вязкого сопротивления, одинаково для всех основных элементов. Таким образом, термодинамическое состояние основного элемента характеризуется тройкой величин: Т, v, $\underline{\underline{d}}$, - где v - относительный удельный объем, $\underline{\underline{d}}$ - девиатор тензора деформации. Плотности $\rho_\circ$ соответствует $v = 1$.

Свободная энергия основного элемента определяется путем интегрирования выражения (2) по любой удобной траектории, соединяющей точки $(0,1,\underline{\underline{0}})$ и $(T,v,\underline{\underline{d}})$. Таковой является траектория, содержащая три участка: $0-1,\ 1-2,\ 2-3.$ На участке $0-1$ задается изменение только температуры: от $0^\circ K$ до Т, - при этом $v = 1,\ \underline{\underline{d}} = \underline{\underline{0}},$ а давление изменяется от 0 до P_T. На участке $1-2$ задается изменение относительного объема: от 1 до $v,$ - при этом температура остается постоянной, $\underline{\underline{d}}=\underline{\underline{0}}$, а давление меняется от P_T до $(P+P_\rho-P_T)$. На участке $2-3$ задается изменение только сдвиговой деформации: от $\underline{\underline{0}}$ до $\underline{\underline{d}}$, - при этом температура и относительный объем остаются постоянными, а сдвиговое напряжение изменяется от $\underline{\underline{0}}$ до $\underline{\underline{П}}$. Результат интегрирования выражения (2) записывается следующим образом.

$$f=f_\circ(T)+\frac{1}{\rho}\int_1^v(P+P_\rho+P_T)dv+\frac{v}{\rho}\int_{\underline{0}}^{\underline{d}}\underline{П}\cdot\cdot d\,\underline{d} \qquad (6).$$

Плотность ρ приобретает роль спектрального параметра, а функция $\chi=\chi(\rho)$ - роль функции, генерирующей релаксационные спектры ТДТ. Компоненты функций $x(t)$, $y(t)$ и $\eta(t)$ представлены следующим образом:

$$x(t)=\{T(t),P(t),\underline{\underline{П}}(t)\},$$
$$y(t)=\{V(t),\underline{\underline{D}}(t)\},$$
$$\eta(t)=\{V(t),\underline{\underline{D}}(t)\},$$

где P и $\underline{\underline{П}}$ - составляющие тензора $\underline{\underline{H}}$,

V и $\underline{\underline{D}}$ - относительный удельный объем и девиатор тензора деформации элементарного объема ТДТ.

В следующем разделе, конкретизирующем характеристики элементов модели, используется присвоение: $\rho:=\rho/\rho_\circ$.

4. Алгоритм вычисления выходной функции $y(t)$.

4.1. Константы: $\rho_1,\rho_2,\bar{\rho},\Delta\rho,\xi,b_1,b_2,k,\upsilon,U_v,U_n,n,\alpha,\beta,\gamma.$

4.2. Переменные: $t,\rho.$

4.3. Функции:

$$P=P(t),\ \underline{\underline{П}}=\underline{\underline{П}}(t),\ T=T(t),\quad \chi=\chi(\rho),$$

$$P_v=\frac{k}{2}(v^{-2}-v^{-4}),\ P_\rho=\frac{k}{2}(\rho^2-\rho^4),$$

$$P_T=b_1T+b_2T^2,\quad K=k(2v^{-4}-v^{-2}),$$

$$N=0.5-n(1-exp(-\frac{U_n}{T+0.1}v^{(\alpha+\beta\ell nv+\gamma T)})),$$

$$G=\frac{3}{2}\cdot\frac{1-2N}{1+N}K,$$

$$v_1=(0.5+(0.25-\frac{2}{k}(P+P_\rho+P_T))^{1/2})^{-1/2},$$

$$\underline{\underline{d_1}}=\underline{\underline{П}}/G(T,v_1),$$

$$\varphi=\upsilon\cdot exp(-\frac{U_v}{T+0.1}v_2{}^{(\alpha+\beta\ell nv_2+\gamma T)}),$$

$$\chi=\frac{\chi_0}{\sqrt{2\pi}}\frac{1}{\Delta\rho}ex\rho(-\frac{(\rho-\bar{\rho})^2}{2(\Delta\rho)^2})\ \text{при}\ \int_{\rho_1}^{\rho_2}\chi(\rho)d\rho=1,$$

$$a_1=(1-\xi)\chi,\qquad a_2=\xi\chi,$$

$$V(t)=\int_{\rho_1}^{\rho_2}(a_1(\rho)\cdot v_1(\rho,t)+a_2(\rho)\cdot v_2(\rho,t))d\rho,$$

$$\underline{\underline{D}}=\int_{\rho_1}^{\rho_2}(a_1(\rho)\underline{\underline{d}}_1(\rho,t)+a_2(\rho)\underline{\underline{d}}_2(\rho,t))d\rho.$$

4.4. Уравнения:

$$\frac{d}{dt}v_2=\frac{\varphi(T,v_2)}{K(v_2)}(P-P_v(v_2)+P_\rho+P_T),\quad t\ge 0,\quad v_2(0)=1;$$

$$\frac{d}{dt}\underline{\underline{d}}_2=\frac{\varphi(T,v_2)}{G(v_2)}(\underline{\underline{\Pi}}-G(v_2)\underline{\underline{d}}_2),\ t\ge 0,\quad \underline{\underline{d}}_2(0)=\underline{\underline{0}}.$$

4.5. Ограничения:

$$v_1<\sqrt{2},\ v_2<\sqrt{2},$$

$$lnv_1>(\gamma T_2)^{-1},\quad lnv_2>-(\alpha+\gamma T_1)/2\beta,$$

$$lnln(\frac{\upsilon}{\omega_1})>(\alpha+\beta lnv_1+\gamma T_1)lnv_1+ln(\frac{U_v}{T_1}),$$

$$lnln(\frac{\upsilon}{\omega_2})<(\alpha+\beta lnv_2+\gamma T_2)lnv_2+ln(\frac{U_v}{T_2}),$$

$$U_v>T_2\,exp(lnln(\frac{\upsilon}{\omega_2})+\frac{1}{4\beta}(\alpha+\gamma T_2)^2).$$

Эти ограничения (для $\rho_1\le\rho\le\rho_2, P_1\le P\le P_2,\quad T_1\le T\le T_2,\quad \omega_1\le\omega\le\omega_2,$ $v_1=v_1(T_1,P_1,\rho_2),\quad v_2=v_2(T_2,P_2,\rho_1),$ где ω - круговая частота) обеспечивают условия физической реализуемости модели: локальную устойчивость, невырожденность релаксационного спектра, уменьшение постоянной времени релаксации с ростом температуры и т.п.

5. Заключение.

В основу элементной базы представленной математической модели ТДТ положены два механизма: механизм атом-атомного взаимодействия, управляемого потенциалом Ленарда-Джонса, и механизм преодоления потоком частиц потенциального барьера, управляемого уравнением Аррениуса. Несмотря на нестрогость этих положений, эффективность математических моделей, построенных на этой элементной базе, оказалась велика. По результатам испытаний гомогенных полимерных материалов при комнатных температурах были предсказаны их динамические характеристики при гелиевых температурах. Было получено удовлетворительное описание такого «капризного» полимера как фторопласт-4 в окрестности фазовых переходов. И, наконец, на базе этой элементной базы были определены (теоретически и экспериментально) константа Бриджмена и параметр Пойнтинга для легированной стали.

Специфика применения рассмотренной модели ТДТ порождается инвариантностью ее начального состояния $(T=0^\circ K, v=1, \underline{\underline{d}}=\underline{\underline{0}})$ на множестве процессов нагружения. Это значит, что эксплуатационному процессу нагружения предшествует "подготовительный" процесс формирования локальной неоднородности ТДТ.

ЛИТЕРАТУРА.

1. Ч.Киттель. Введение в физику твердого тела. – М: «Наука», 1978. - 792с.
2. Р.Труэлл, Ч.Эльбаум, Б.Чик. Ультразвуковые методы в физике твердого тела. – М: Мир, 1979. – 307с.
3. А.Г.Самойлович. Термодинамика и статистическая физика. – М: ГИТТЛ, 1955. – 368с.
4. Р.Калман, П.Фалб, М.Арбиб. Очерки по математической теории систем. – М: Мир, 1971. – 400с.