УДК 536.4:539.3

В. С. Зарубин, Г. Н. Кувыркин

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЙ ПОДХОД К ПОСТРОЕНИЮ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ТЕРМОМЕХАНИКИ

Изложен подход к построению математических моделей термомеханических процессов в сплошной среде, характерных для современной техники и технологии. При определении структуры моделей использованы законы сохранения физических субстанций (в частности, закон сохранения энергии) и соотношения термодинамики необратимых процессов.

Основные положения термодинамики позволяют определить общую структуру математических моделей достаточно широкого класса реальных процессов, характерных для современной техники и технологии. Эта структура может быть конкретизирована применительно к термомеханическим процессам в сплошной среде с известными или предполагаемыми свойствами.

В прикладных исследованиях обычно используют модели, описывающие структурно-неоднородную многокомпонентную сплошную среду как макроскопически однородную с осредненными характеристиками. Это часто не позволяет отразить существенные особенности поведения такой среды, например при высокоинтенсивных термомеханических процессах с быстро изменяющимися параметрами термодинамического состояния [1]. Математические модели таких процессов должны учитывать изменения микроструктуры среды, а также явления запаздывания и перекрестные эффекты при аккумуляции и переносе энергии, массы и количества движения.

Обоснованный учет отмеченных особенностей возможен с привлечением соотношений термодинамики необратимых процессов. Используем первый закон термодинамики (закон сохранения энергии) в виде [2]

$$\rho_0 du/dt = T_{ji} dL_{ij}/dt - \partial q_i/\partial a_i + q_V\,, \quad i,j = 1,2,3\,, \tag{1}$$

где ρ_0 — плотность среды в начальной конфигурации; u — массовая плотность внутренней энергии; t — время; T_{ji} и L_{ij} — компоненты тензора Пиолы–Кирхгофа и лагранжева тензора конечной деформации соответственно; q_i — проекции вектора плотности теплового потока на оси Ox_i прямоугольной системы координат; a_i — материальные координаты частицы сплошной среды; q_V — объемная плотность мощности внутренних источников (или стоков) теплоты. Второй закон термодинамики представим в форме неравенства Клаузиуса–Дюгема [2]

$$\rho_0 T\, dh/dt \geq -\partial q_i/\partial a_i + (q_i/T)\, \partial T/\partial a_i + q_V, \tag{2}$$

где T — абсолютная температура, h — массовая плотность энтропии. В (1), (2) и далее использовано правило суммирования по одинаковым индексам.

В дальнейшем в качестве одной из термодинамических функций, характеризующих состояние сплошной среды, удобно использовать массовую плотность свободной энергии $A = u - Th$. Продифференцировав это равенство по времени t и объединив полученный результат с (1), запишем

$$\rho_0 T\, dh/dt = T_{ji}(dL_{ij}/dt) - \rho_0(dA/dt + h\, dT/dt) - \partial q_i/\partial a_i + q_V, \tag{3}$$

Вычитая это равенство из (2), получаем общее диссипативное неравенство

$$T_{ji}\, dL_{ij}/dt - \rho_0(dA/dt + h\, dT/dt) \geq (q_i/T)\, \partial T/\partial a_i, \tag{4}$$

которое является основным соотношением при термодинамическом подходе к построению математических моделей термомеханических процессов в сплошной среде.

Пусть текущее состояние сплошной среды в момент времени t в окрестности любой ее частицы характеризуют A, h, T_{ji} и q_i. В качестве аргументов этих функций примем L_{ij}, T и $\theta_k = \partial T/\partial a_k$, а также внутренние параметры состояния $\chi^{(\alpha)}$, $\chi_i^{(\beta)}$, $\chi_{ij}^{(\gamma)}$ $(\alpha = \overline{1,\, \alpha_K};$ $\beta = \overline{1,\, \beta_M};$ $\gamma = \overline{1,\, \gamma_N}\,)$. Физический смысл внутренних параметров состояния зависит от свойств конкретной сплошной среды и особенностей реального термомеханического процесса. Введение этих параметров дает возможность связать макроскопическое поведение сплошной среды с процессами, протекающими на микроуровне. Например, скалярными параметрами $\chi^{(\alpha)}$ могут быть температуры отдельных структурных элементов среды или концентрации фаз и веществ, входящих в состав среды. Роль векторных внутренних параметров с компонентами $\chi_i^{(\beta)}$ могут выполнять потоки массы, энергии и количества движения, переносимые элементами микроструктуры среды, а тензорных параметров с компонентами $\chi_{ij}^{(\gamma)}$ — микронапряжения [3, 4].

Предположим, что скорости изменения внутренних параметров зависят лишь от текущего состояния сплошной среды в окрестности рассматриваемой частицы, т.е.

$$d\chi^{(\alpha)}/dt = \kappa^{(\alpha)}, \quad d\chi_i^{(\beta)}/dt = \kappa_i^{(\beta)}, \quad d\chi_{ij}^{(\gamma)}/dt = \kappa_{ij}^{(\gamma)}, \tag{5}$$

где $\kappa^{(\alpha)}$, $\kappa_i^{(\beta)}$ и $\kappa_{ij}^{(\gamma)}$ — функции перечисленных выше аргументов, от которых зависят функции A, h, T_{ji} и q_i.

В общем случае с целью отражения предыстории поведения среды зависимости выбранных функций A, h, T_{ji} и q_i от своих аргументов целесообразно представить в виде интегралов по времени с переменным верхним пределом t от подынтегральных функций, зависящих от значений перечисленных аргументов в моменты времени $\tau < t$. Тогда A, h, T_{ji} и q_i будут представлять собой функционалы, которые в текущий момент времени t отображают множества значений этих аргументов в предшествующие моменты времени на множество действительных чисел [2]. Один из вариантов построения таких функционалов можно связать с введением векторной функции $\boldsymbol{f}(\tau)$, каждая из координатных функций которой зависит от значений соответствующего аргумента термодинамических функций в момент времени τ. Тогда влияние состояния сплошной среды в окрестности рассматриваемой частицы в момент времени $\tau < t$ на состояние в момент времени t с учетом принципа затухающей памяти [5] можно учесть при помощи функции $\phi(t,\tau) = \boldsymbol{g}(t-\tau)\cdot\boldsymbol{f}(\tau)$, где $\boldsymbol{g}(s)$ — векторная функция, координатные функции которой ограничены при $s = t - \tau \geq 0$, положительны и монотонно убывают до нуля по мере увеличения "срока давности" s, выполняя роль весовых коэффициентов влияния предшествующих значений аргументов термодинамических функций.

Влияние всей предыстории изменения состояний будет отражать функция

$$\Phi(t) = \int\limits_{-\infty}^{t} \phi(t,\tau)\,d\tau = \int\limits_{-\infty}^{t} \boldsymbol{g}(t-\tau)\cdot\boldsymbol{f}(\tau)\,d\tau. \tag{6}$$

Применительно к массовой плотности свободной энергии можно записать $A = \tilde{A}\big(\Phi(t)\big)$, а для ее полной производной по времени —

$$\frac{dA}{dt} = \frac{d\tilde{A}}{d\Phi}\,\frac{d\Phi}{dt} = \frac{d\tilde{A}}{d\Phi}\left(\boldsymbol{g}(0)\cdot\boldsymbol{f}(t) + \int\limits_{-\infty}^{t} \frac{\partial\boldsymbol{g}(t-\tau)}{\partial t}\cdot\boldsymbol{f}(\tau)\,d\tau\right).$$

Тогда вместо (4) получим неравенство

$$T_{ji}\,dL_{ij}/dt - \rho_0\big((d\tilde{A}/d\Phi)\,d\Phi/dt + h\,dT/dt\big) \geq (q_i/T)\,\partial T/\partial a_i,$$

выполнение которого является необходимым условием реализуемости рассматриваемого термомеханического процесса в сплошной среде, обычно называемой сплошной средой с памятью.

Если в (6) функцию $\boldsymbol{g}(s)$ заменить на $\boldsymbol{g}_0\delta(s)$, где вектор $\boldsymbol{g}_0$ образован постоянными весовыми коэффициентами влияния перечисленных выше аргументов функций, характеризующих состояние сплошной среды, а $\delta(s)$ — функция Дирака, то получим $\Phi(t) \equiv \boldsymbol{g}_0 \cdot \boldsymbol{f}(t)$, что соответствует "нулевой памяти". Тогда в каждый текущий момент времени массовая плотность A свободной энергии будет зависеть лишь от текущих значений своих аргументов и не будет явно зависеть от t, т.е. $A = A\big(L_{ij}, T, \theta_i, \chi^{(\alpha)}, \chi_i^{(\beta)}, \chi_{ij}^{(\gamma)}\big)$. В этом случае

$$dA/dt = (\partial A/\partial L_{ji})\, dL_{ji}/dt + (\partial A/\partial T)\, dT/dt + (\partial A/\partial \theta_i)\, d\theta_i/dt +$$

$$+ (\partial A/\partial \chi^{(\alpha)})\, d\chi^{(\alpha)}/dt + (\partial A/\partial \chi_i^{(\beta)})\, d\chi_i^{(\beta)}/dt + (\partial A/\partial \chi_{ij}^{(\gamma)})\, d\chi_{ij}^{(\gamma)}/dt.$$

Подставив это равенство в (4), получим неравенство

$$-\Big(\frac{\partial A}{\partial L_{ij}} - \frac{T_{ji}}{\rho_0}\Big)\frac{dL_{ij}}{dt} - \Big(\frac{\partial A}{\partial T} + h\Big)\frac{dT}{dt} - \frac{\partial A}{\partial \theta_i}\,\frac{d\theta_i}{dt} -$$

$$-\frac{\partial A}{\partial \chi^{(\alpha)}}\,\frac{d\chi^{(\alpha)}}{dt} - \frac{\partial A}{\partial \chi_i^{(\beta)}}\,\frac{d\chi_i^{(\beta)}}{dt} - \frac{\partial A}{\partial \chi_{ij}^{(\gamma)}}\,\frac{d\chi_{ij}^{(\gamma)}}{dt} - \frac{q_i}{\rho_0 T}\,\frac{\partial T}{\partial a_i} \geq 0.$$

Так как второй закон термодинамики справедлив для произвольных скоростей изменения L_{ij}, T и θ_i, из полученного неравенства следует, что достаточным условием реализуемости рассматриваемого термомеханического процесса является выполнение равенств

$$T_{ji} = \rho_0\, \partial A/\partial L_{ij}, \quad h = -\partial A/\partial T, \quad \partial A/\partial \theta_i = 0 \tag{7}$$

и неравенства

$$\delta_D \geq (q_i/T)\, \partial T/\partial a_i, \tag{8}$$

где диссипативная функция

$$\delta_D = -\rho_0\Big(\frac{\partial A}{\partial \chi^{(\alpha)}}\,\frac{d\chi^{(\alpha)}}{dt} + \frac{\partial A}{\partial \chi_i^{(\beta)}}\,\frac{d\chi_i^{(\beta)}}{dt} + \frac{\partial A}{\partial \chi_{ij}^{(\gamma)}}\,\frac{d\chi_{ij}^{(\gamma)}}{dt}\Big).$$

Таким образом, (5) и (7) определяют структуру математической модели термомеханического процесса в сплошной среде с “нулевой памятью”. При этом вид функций, характеризующих состояние среды, и конкретная форма (5) не должны противоречить (8). С учетом (7) вместо (3) получим

$$-\rho_0 T(\partial^2 A/\partial T^2)\, dT/dt = \delta_D - \partial q_i/\partial a_i + q_V -$$

$$-\rho_0 T\left(\frac{\partial h}{\partial L_{ij}}\,\frac{dL_{ij}}{dt} + \frac{\partial h}{\partial \chi^{(\alpha)}}\,\frac{d\chi^{(\alpha)}}{dt} + \frac{\partial h}{\partial \chi_i^{(\beta)}}\,\frac{d\chi_i^{(\beta)}}{dt} + \frac{\partial h}{\partial \chi_{ij}^{(\gamma)}}\,\frac{d\chi_{ij}^{(\gamma)}}{dt}\right).$$

Слагаемые, заключенные в скобки в правой части этого равенства, зависят от скорости изменения внутренних параметров состояния и характеризуют термомеханическую связанность протекающих процессов.

Если же в (6) считать координатные функции векторной функции $\boldsymbol{g}(s)$ достаточно быстро убывающими при $s > 0$, то в линейном приближении можно принять [6] $\boldsymbol{g}(s) = \boldsymbol{g}_0\,\delta(s) + \boldsymbol{g}_1\bigl(d\,\delta(s)/ds\bigr)$, что отвечает "бесконечно короткой памяти". Тогда, согласно (6), получим $\Phi(t) = \boldsymbol{g}_0 \cdot \boldsymbol{f}(t) + \boldsymbol{g}_1 \cdot \bigl(d\boldsymbol{f}(t)/dt\bigr)$, что соответствует математической модели сплошной среды скоростного типа. В этом варианте математической модели функции, характеризующие текущее состояние сплошной среды в окрестности рассматриваемой частицы, будут зависеть не только от текущих значений перечисленных выше аргументов, но и от скоростей изменения этих аргументов.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 08-08-615а) и по гранту НШ 4140.2008 поддержки ведущих научных школ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Кувыркин Г. Н. Термомеханика деформируемого твердого тела при высокоинтенсивном нагружении. – М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 1993. 142 с.
2. Зарубин В. С., Кувыркин Г. Н. Математические модели термомеханики. – М.: Физматлит, 2002. – 168 с.
3. Зарубин В. С., Кувыркин Г. Н. Термомеханическая модель релаксирующего твердого тела при нестационарном нагружении // Доклады РАН. – 1995. – Т. 345, № 2. – С. 193–195.
4. Зарубин В. С., Кувыркин Г. Н. О построении термомеханической модели релаксирующего твердого тела // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. “Естественные науки”. – 2001. – № 2(7). – С. 23–30.
5. Коларов Д., Балтов А., Бончева Н. Механика пластических сред: Пер. с болг. – М.: Мир, 1979. – 304 с.
6. Кристенсен Р. Введение в теорию вязкоупругости: Пер. с англ. – М.: Мир, 1974. – 338 с.

Статья поступила в редакцию 26.05.2008

Владимир Степанович Зарубин родился в 1933 г., окончил МВТУ им. Н.Э. Баумана в 1957 г. Д-р техн. наук, профессор кафедры “Прикладная математика” МГТУ им. Н.Э. Баумана. Автор более 250 печатных работ в области прикладной математики и математического моделирования технических систем, термомеханики и термопрочности элементов конструкций.

V.S. Zarubin (b. 1933) graduated from the Moscow Higher Technical School in 1957. D. Sc. (Eng.), professor of “Applied Mathematics” department of the Bauman Moscow State Technical University. Author of more than 250 publications in the field of applied mathematics and mathematical simulation of technical systems, thermomechanics ant thermal strength of components of constructions.

Георгий Николаевич Кувыркин родился в 1946 г., окончил МВТУ им. Н.Э. Баумана в 1970 г. Д-р техн. наук, профессор, зав. кафедрой “Прикладная математика” МГТУ им. Н.Э. Баумана. Автор более 150 печатных работ в области математического моделирования термомеханических процессов в материалах и элементах конструкций.

G.N. Kuvyrkin (b. 1946) graduated from the Moscow Higher Technical School in 1970. D. Sc. (Eng.), professor, head of “Applied Mathematics” department of the Bauman Moscow State Technical University. Author of more than 150 publications in the field of mathematical simulation of thermomechanical processes in materials ant components of constructions.