

ДЖЕРЕЛА МАСИ ТА МОДЕЛЮВАННЯ ПРИПОВЕРХНЕВОЇ НЕОДНОРІДНОСТІ У ДЕФОРМІВНИХ ТВЕРДИХ ТІЛАХ

Запропоновано підхід до опису термопружних процесів у деформівних твердих тілах з урахуванням структурної неоднорідності матеріалу та геометричної неоднорідності поверхні тіла. При формулюванні вихідних співвідношень використано методи термодинаміки нерівноважних процесів і нелінійної механіки суцільного середовища. Структуру матеріалу враховано введенням необоротної складової вектора потоку маси, а геометричну приповерхневу неоднорідність тіла – введенням джерел маси, що моделюють її властивості, а також залежністю характеристик матеріалу, включно з модулями пружності, від густини. Вивчено рівноважний стан півпростору. Показано, що розподілам напружень і густини властиві два характерні розміри, один з яких пов'язаний зі структурною неоднорідністю матеріалу, а інший – з геометричною неоднорідністю реальної поверхні тіла. Обговорено межі застосовності локально градієнтного підходу за лінеаризованого наближення.

Вступ. В останні роки у зв'язку з інтенсивним розвитком мікроелектроніки, широким використанням наноматеріалів у техніці, біоінженерії тощо зріс інтерес до неklasичних моделей механіки суцільного середовища. Моделі механіки суцільного середовища використовують ідеалізоване бачення реального твердого тіла, що відображає його основні практично важливі властивості. У таких моделях не можна описати ряду ефектів, властивих новим матеріалам, які пов'язані з мікροструктурою матеріалу [17, 24]. Це зумовлює необхідність розширення класичних моделей до опису таких характерних для наноматеріалу ефектів, як приповерхнева та структурна неоднорідності. Для вивчення поведінки структурно неоднорідних твердих тіл на континуальному рівні використовують усереднені характеристики. Такий опис пов'язаний з труднощами, якщо принаймні один із розмірів тіла є співмірним із характерним розміром структурної неоднорідності, а також у випадку, коли предметом вивчення є тіла, характерний розмір яких належить до певного діапазону зміни. Тоді необхідно постулювати залежність осереднених характеристик від характерного розміру тіла, оскільки параметри міцності та теплопровідності, пружні властивості тощо суттєво залежать від такого розміру. Експериментальному та теоретичному вивченню розмірних ефектів присвячено численні роботи, зокрема у [13] подано огляд досліджень розмірного ефекту межі міцності у квазікрихких матеріалах, у [4, 12, 15, 24, 27] зосереджено увагу на побудові наномеханіки композитів, обговорено принципи гомогенізації і приповерхневі ефекти, а також границі застосування континуального підходу.

Моделями, які за континуального підходу тою чи іншою мірою враховують структуру матеріалу, є нелокальні та градієнтні моделі механіки. Такі моделі базуються на узагальненні класичного рівняння Гука, а саме на включенні просторових похідних у співвідношення, що пов'язує тензори напружень та деформації, або на поданні залежності між цими тензорами у вигляді просторової функціональної залежності [9, 16, 19, 20, 22]. Порівняння моделей, що базуються на градієнтних та інтегральних формулюваннях, а також застосування цих моделей обговорено в [9, 10, 11, 14, 19, 21, 23, 28].

Іншим підходом до опису структурної та приповерхневої неоднорідностей є локально градієнтний підхід у термомеханіці [1, 2]. Він базується на загальних положеннях термодинаміки нерівноважних процесів [3] та нелінійної механіки суцільного середовища. При цьому деформівне тверде тіло розглядається як відкрита термодинамічна система. У рамках підходу побудовано ряд моделей і показано, що такий підхід дозволяє враховувати

приповерхневу неоднорідність та описувати окремі розмірні ефекти, у тому числі залежності поверхневих напружень і межі міцності від характерного розміру, а також вплив на них полів різної фізичної природи [2, 5, 18]. При формулюванні крайових задач у межах локально градієнтного підходу на поверхні тіла задавали постійне значення хімічного потенціалу (параметра, спряженого до густини), збурення якого можна ототожнити зі збуренням енергії зв'язку. Однак подальші дослідження показали, що не існує методів безпосереднього визначення такої енергетичної характеристики, якою є хімічний потенціал. У роботі [6] запропоновано формулювання граничної умови стосовно густини, яку пов'язано з геометричною неоднорідністю поверхні (шорсткістю поверхні). Це суттєво змінило трактування локально градієнтного підходу та одержаних результатів.

У цій роботі запропоновано розширення локально градієнтного підходу на коректний опис поведінки деформівних твердих тіл, один із характерних розмірів яких є співмірним з областю приповерхневої неоднорідності, шляхом введення джерел маси та врахування залежності параметрів матеріалу, зокрема модулів пружності, від густини. Сформульовано основні співвідношення та на прикладі півпростору вказано на відмінності, зумовлені розширенням моделі.

1. Вихідні положення модельного опису. Розглянемо деформівне тверде тіло, в якому за базові приймаємо процеси теплопровідності, деформування та зміни густини. Повна енергія E у довільно виокремленій області тіла (V) може змінюватися за рахунок виконання механічної роботи, притоку тепла та маси, тому рівняння балансу повної енергії для цієї області можна записати у вигляді

$$\frac{d}{dt} \int_{(V)} E dV = \mathbf{n} \cdot \int_{(\partial V)} (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{v} - T \mathbf{J}_s - H \mathbf{J}_m) d\Sigma + \int_{(V)} \sigma_E dV, \quad (1)$$

де τ – час, $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ – тензор напружень Коші, \mathbf{v} – вектор швидкості, \mathbf{J}_s , \mathbf{J}_m – вектори потоків ентропії та маси, T , H – абсолютна температура та хімічний потенціал, σ_E – джерела енергії, (∂V) – поверхня області (V), \mathbf{n} – одинична зовнішня нормаль до поверхні (∂V) , крапкою позначено скалярний добуток.

Термодинаміка нерівноважних процесів зорієнтована на термодинамічно замкнуті системи. Тому при розгляді структурно стабільних тіл потік маси та джерела енергії у правій частині співвідношення (1) слід відкинути, тобто прийняти, що $\mathbf{J}_m = 0$, $\sigma_E = 0$. Однак, оскільки метою роботи є врахування структури матеріалу та структури поверхні тіла, то вважатимемо, що ці співвідношення справджуються для часу $\tau > 0$, а структура матеріалу та поверхня раптово виникають у початковий момент часу $\tau = 0$ і надалі властивості матеріалу та тіла не змінюються.

Рівняння (1), записане у локальній формі при нехтуванні конвективною складовою потоків, має такий вигляд:

$$\frac{\partial E}{\partial \tau} = \nabla \cdot (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{v} - T \mathbf{J}_s - H \mathbf{J}_m) + \sigma_E, \quad (2)$$

де ∇ – диференціальний оператор Гамільтона.

Крім рівняння (2), повинні виконуватися рівняння балансу імпульсу, ентропії та маси, які для прийнятого вище наближення мають вигляд

$$\frac{\partial \mathbf{k}_v}{\partial \tau} = \nabla \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}, \quad \frac{\partial S}{\partial \tau} = -\nabla \cdot \mathbf{J}_s + \sigma_s, \quad \frac{\partial \rho}{\partial \tau} = -\nabla \cdot \mathbf{J}_m + \sigma_m, \quad (3)$$

де \mathbf{k}_v – імпульс механічного поступального руху, ρ – густина, σ_s , σ_m – виробництво ентропії і маси. Зазначимо, що виробництво ентропії σ_s згідно з другим законом термодинаміки є невід'ємним у кожній точці у кожен мо-

мент часу [3], а для джерел маси приймаємо, що $\sigma_m = \sigma_E/H$. Джерела маси далі будемо пов'язувати із формуванням реальної поверхні тіла та її відмінністю від геометрично ідеальної поверхні області (∂V).

Використовуючи співвідношення (3), а також подання повної енергії як суми внутрішньої U та кінетичної K енергій разом із загальноприйнятим виразом для приросту кінетичної енергії $dK = \mathbf{v} \cdot d\mathbf{k}_v$, рівняння балансу повної енергії зводимо до вигляду

$$\frac{\partial U}{\partial \tau} = \hat{\boldsymbol{\sigma}} : \frac{\partial \hat{\mathbf{e}}}{\partial \tau} + H \frac{\partial \rho}{\partial \tau} + T \frac{\partial S}{\partial \tau} - T \sigma_s - \mathbf{J}_s \cdot \nabla T - \mathbf{J}_m \cdot \nabla H, \quad (4)$$

де $\hat{\mathbf{e}}$ – тензор деформації.

Рівняння (4) називають рівнянням балансу внутрішньої енергії. Це рівняння є базовим при формулюванні визначальних співвідношень (рівнянь стану та кінетичних рівнянь) моделі.

2. Визначальні співвідношення. Причиною виникнення термодинамічних потоків \mathbf{J}_m , \mathbf{J}_s є термодинамічні сили, які, як правило, зумовлені градієнтами полів ∇T , ∇H . Тому, приймаючи, що існує залежність між термодинамічними потоками і силами, кінетичні рівняння записують у такій загальній формі:

$$\mathbf{J}_m = \mathbf{J}_m(\nabla T, \nabla H), \quad \mathbf{J}_s = \mathbf{J}_s(\nabla T, \nabla H).$$

Більш загальним поданням залежності потоків від сил є залежність

$$\mathbf{J}_s = \mathbf{J}_s^\tau(\nabla T, \nabla H), \quad \mathbf{J}_m = \mathbf{J}_m^\tau(\nabla T, \nabla H), \quad (5)$$

де $\mathbf{J}_s^\tau(\nabla T, \nabla H)$, $\mathbf{J}_m^\tau(\nabla T, \nabla H)$ – функціонали (в основному, у вигляді інтегралів за часом), що перетворюють актуальні значення сил $\nabla T(\tau)$, $\nabla H(\tau)$ і їх історії $\nabla T(\zeta)$, $\nabla H(\zeta)$, $0 \leq \zeta < \tau$, на актуальні значення відповідних потоків.

Для ізотропного матеріалу співвідношення (5) можна подати у такому лінійному вигляді:

$$\mathbf{J}_\alpha = G_{\alpha s} * \nabla T + G_{\alpha m} * \nabla H, \quad \alpha, \beta = \{s, m\}, \quad (6)$$

де $G_{\alpha\beta}$ – функціонали по історії зміни сил:

$$G_{\alpha\beta} * f = \int_{-\infty}^{\tau} g_{\alpha\beta}(\tau, \zeta) \frac{\partial f(\zeta)}{\partial \zeta} d\zeta, \quad \alpha, \beta = \{s, m\}, \quad (6')$$

$g_{\alpha\beta}(\tau, \zeta)$ – функції впливу (ядра).

Вибором функції впливу конкретизуємо вигляд залежності термодинамічних потоків від сил. Врахування залежності функції впливу $g_{\alpha\beta}(\tau, \zeta)$ від змінної інтегрування ζ приводить до врахування залежності потоків від історії зміни сил. Якщо функція впливу $g_{\alpha\beta}$ не залежить від ζ , то вираз у (6') буде лінійною функцією. Якщо ж функція впливу є пропорційною до дельта-функції різницевого аргументу $\delta(\tau - \zeta)$, тоді говорять про незатухаючу пам'ять про деяку подію у початковий момент часу.

Далі для опису теплових процесів приймемо наближення класичної термопружності. Вважаємо також, що у початковий момент часу раптово виникає певна структура матеріалу, що врахуємо у виразі для потоку маси. У зв'язку з цим для функцій впливу приймемо

$$g_{ss}(\tau, \zeta) = -\frac{\lambda_s}{T(\tau)}, \quad g_{sm}(\tau, \zeta) = g_{ms}(\tau, \zeta) = 0, \\ g_{mm}(\tau, \zeta) = -g_{mm} \delta(\tau - \zeta). \quad (7)$$

Тут λ_s , g_{mm} – сталі.

Враховуючи подання (7) у співвідношеннях (6), для термодинамічних потоків \mathbf{J}_m , \mathbf{J}_s запишемо

$$\mathbf{J}_s = -\lambda_s \frac{\nabla T}{T}, \quad \mathbf{J}_m = -g_{mm} \frac{\partial \nabla H}{\partial \tau}. \quad (8)$$

З огляду на подання (8) модифікуємо рівняння балансу маси:

$$\frac{\partial}{\partial \tau} (\rho - g_{mm} \nabla^2 H) = \sigma_m. \quad (9)$$

Враховуючи (8) у рівнянні (4) балансу внутрішньої енергії U , маємо

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \left(U - \frac{g_{mm}}{2} \nabla H \cdot \nabla H \right) = \hat{\sigma} : \frac{\partial \hat{\mathbf{e}}}{\partial \tau} + T \frac{\partial S}{\partial \tau} + H \frac{\partial \rho}{\partial \tau} - T \sigma_s + \lambda_s \nabla T \cdot \frac{\nabla T}{T}.$$

Для виробництва ентропії σ_s приймаємо класичний для термопружного тіла вираз [3]

$$\sigma_s = \lambda_s \frac{\nabla T}{T} \cdot \frac{\nabla T}{T}. \quad (10)$$

Вводячи у розгляд енергію F перетворенням

$$F = U - TS - \frac{g_{mm}}{2} \nabla H \cdot \nabla H,$$

для її приросту на основі (10) запишемо

$$dF = \hat{\sigma} : d\hat{\mathbf{e}} - SdT + Hd\rho. \quad (11)$$

Аналіз цього співвідношення вказує на те, що хімічний потенціал H є енергією, яку потрібно затратити для того, щоб перенести виділену матеріальну точку з нескінченності у розглядувану точку тіла (у загальному – щоб змінити густину ρ на одиницю). Якщо врахувати, що матеріальна точка на нескінченності за межами тіла є вільною, а у тілі вона зв'язана і разом з іншими утворює скелет тіла, то можна стверджувати, що збурення хімічного потенціалу дорівнює збуренню енергії зв'язку частинок.

Енергія F залежить від деформацій $\hat{\mathbf{e}}$, температури T і густини ρ :

$$F = F(\hat{\mathbf{e}}, T, \rho).$$

Співвідношення (11) дозволяє записати такі рівняння стану:

$$\hat{\sigma} = \frac{\partial F}{\partial \hat{\mathbf{e}}}, \quad S = -\frac{\partial F}{\partial T}, \quad H = \frac{\partial F}{\partial \rho}. \quad (12)$$

Означення простору базових параметрів стану передбачає, що кожен з цих параметрів може змінюватися незалежно від інших. Оскільки густина є властивістю матеріалу, а в запропонованій моделі вона входить у простір параметрів стану, то в загальному випадку відповідним чином слід змінювати інші властивості матеріалу.

Дальша конкретизація моделі пов'язана з конкретизацією рівнянь стану та відлікового стану. За відліковий стан приймемо стан однорідного ізоτροпного середовища, вільного від силового навантаження, з параметрами

$$T = T_*, \quad S = S_*, \quad H = H_*, \quad \rho = \rho_*, \quad \hat{\mathbf{e}} = 0, \quad \hat{\sigma} = 0.$$

У просторі збурень базових параметрів стану

$$\theta = T - T_*, \quad \rho - \rho_*, \quad \hat{\mathbf{e}} = \hat{\mathbf{e}} - 0$$

енергію F подамо у вигляді квадратичної функції

$$F = F_* - S_* \theta + H_*(\rho - \rho_*) + \frac{1}{2} \lambda e^2 + \mu \hat{\mathbf{e}} : \hat{\mathbf{e}} - (3\lambda + 2\mu) a_t e \theta - (3\lambda + 2\mu) a_m \times \\ \times e(\rho - \rho_*) + \alpha_{mt} (\rho - \rho_*) \theta + \frac{1}{2} \alpha_{mm} (\rho - \rho_*)^2 - \frac{c_v}{2T_*} \theta^2, \quad (13)$$

де λ , μ , a_t , a_m , α_{mt} , α_{mm} – характеристики матеріалу, $e = \hat{\mathbf{e}} : \hat{\mathbf{I}}$, $\hat{\mathbf{I}}$ – оди-

ничний тензор. Слід зазначити, що таке подання для енергії F відповідає матеріалу з мікроструктурою, для якого збурення густини ρ є малим: $|\rho - \rho_*|/\rho_* \ll 1$. Якщо ж залежність від густини є істотною, то у поданні (13) необхідно враховувати вищі порядки відносно збурення густини. У загальному випадку можна врахувати також залежність від густини характеристик матеріалу λ, μ .

Сформульована вище система рівнянь, яка складається з рівнянь балансу імпульсу та ентропії (перше та друге з рівнянь системи (3)), балансу маси (9), виразу (10) для виробництва ентропії разом з рівняннями стану (12), формулою для імпульсу механічного поступального руху

$$\mathbf{k}_v = \rho \mathbf{v},$$

а також співвідношенням Коші для тензора деформації

$$\hat{\mathbf{e}} = \frac{1}{2}[\nabla \otimes \mathbf{u} + (\nabla \otimes \mathbf{u})^\top]$$

складають повну систему рівнянь моделі термопружного тіла з урахуванням енергії зв'язку. Тут \mathbf{u} – вектор переміщення, \otimes – символ діадного добутку, індексом « \top » позначено операцію транспонування.

2. Тіла з мікроструктурою. Ключова система рівнянь. Для середовища з мікроструктурою необхідно прийняти, що збурення густини відносно відлікового значення є малим: $|\rho - \rho_*|/\rho_* \ll 1$. За такого наближення можна вважати, що характеристики матеріалу у співвідношенні (13) є сталими. На основі (12), (13) запишемо явний вигляд рівнянь стану для $S, \rho, \hat{\boldsymbol{\sigma}}$:

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}} = 2\mu\hat{\mathbf{e}} + [\lambda e - (3\lambda + 2\mu)a_m(\rho - \rho_*) - (3\lambda + 2\mu)a_t\theta]\hat{\mathbf{I}},$$

$$S = S_* + (3\lambda + 2\mu)a_t e - \alpha_{mt}(\rho - \rho_*) + \frac{c_v}{T_*}\theta,$$

$$H = H_* - (3\lambda + 2\mu)a_m e + \alpha_{mm}(\rho - \rho_*) + \alpha_{mt}\theta.$$

Приймаючи за ключові функції вектор переміщень \mathbf{u} , збурення температури θ та густини $\rho - \rho_*$, для опису стаціонарного стану запишемо таку лінеаризовану систему рівнянь моделі:

$$\mu\nabla^2\mathbf{u} + (\lambda + \mu)\nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) - (3\lambda + 2\mu)[a_m\nabla(\rho - \rho_*) + a_t\nabla\theta] = 0,$$

$$\nabla^2\theta = 0, \quad \nabla^2(\rho - \rho_*) - \alpha^2(\rho - \rho_*) + \alpha^2 f_{\sigma m} = 0, \quad (14)$$

де

$$\frac{1}{\alpha^2} = g_{mm} \left[\alpha_{mm} - \frac{(3\lambda + 2\mu)^2}{\lambda + 2\mu} a_m^2 \right], \quad f_{\sigma m} = \int_{-\infty}^{\tau} \sigma_m d\tau.$$

Якщо замість вектора переміщення \mathbf{u} за ключову функцію вибрати тензор напружень $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$, ключова система рівнянь набуває вигляду

$$\nabla \times \left[\nabla \times \left(\frac{\hat{\boldsymbol{\sigma}}}{2\mu} - \left(\frac{\lambda\sigma}{2\mu(3\lambda + 2\mu)} + a_m(\rho - \rho_*) + a_t\theta \right) \hat{\mathbf{I}} \right) \right] = 0,$$

$$\nabla^2\theta = 0, \quad \nabla^2(\rho - \rho_*) - \alpha^2(\rho - \rho_*) + \alpha^2 f_{\sigma m} = 0, \quad (15)$$

де $\sigma = \hat{\boldsymbol{\sigma}} : \hat{\mathbf{I}}$.

На основі аналізу співвідношень (14), (15) можна стверджувати, що вивчення термопружного стану деформівного твердого тіла у зв'язаній постановці в межах моделі зводиться до послідовного визначення температури та густини при наступному вивченні напружено-деформованого стану.

При формулюванні крайових задач до сформульованої системи рівнянь необхідно додати відповідні граничні умови. Прийmemo їх у вигляді

$$\hat{\sigma} \cdot \mathbf{n}|_{(\partial V_\sigma)} = \boldsymbol{\sigma}_a, \quad \mathbf{u}|_{(\partial V_u)} = \mathbf{u}_a, \quad \theta|_{(\partial V)} = \theta_a, \quad \rho|_{(\partial V)} = \rho_a, \quad (16)$$

де (∂V_σ) , (∂V_u) – частини поверхні тіла, на яких задано вектор зусиль $\boldsymbol{\sigma}_a$ та вектор переміщення \mathbf{u}_a , $(\partial V_\sigma) \cup (\partial V_u) = (\partial V)$, θ_a , ρ_a – поверхневі значення температури та густини.

Зупинимосся коротко на необхідності введення у модель джерел маси, а також на їх конкретизації. Якщо у третьому рівнянні системи (14) знехтувати джерелами маси, то воно набуває вигляду

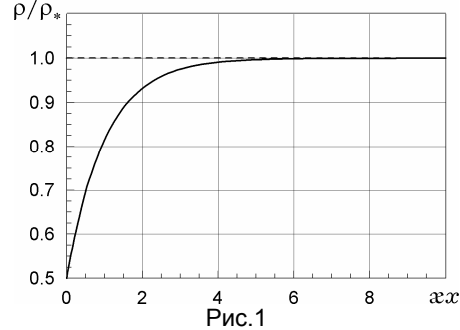
$$\nabla^2(\rho - \rho_*) - \alpha^2(\rho - \rho_*) = 0.$$

Розв'язком цього рівняння для півпростору (область $|x| \geq 0$), який справджує граничну умову (16) для густини та умову обмеженості розв'язку при $x \rightarrow \infty$, є

$$\rho = \rho_* + (\rho_a - \rho_*) \exp(-\alpha x).$$

На рис. 1 зображено розподіл густини ρ/ρ_* у півпросторі при $\rho_a/\rho_* = 0.5$. Пунктирна лінія відповідає густині у відліковому стані.

Бачимо, що у приповерхневій області значення густини істотно відрізняється від значення густини відлікового тіла. Це дозволяє говорити про приповерхневий «дефект маси». Очевидно, що такий дефект маси є особливо істотним при моделюванні та дослідженні поведінки тіл, один з розмірів яких є співмірним із характерним розміром області приповерхневої неоднорідності (α^{-1}).



Одними з характеристик тіла у відліковому стані є λ і μ . Є очевидним, що зміна густини тіла може істотно залежати від значення його пружних модулів. Це накладає обмеження на застосовність моделі, яка представлена у цій роботі (характеристики матеріалу є сталими), у вигляді вимоги, що характерний розмір тіл є значно більшим від розміру області приповерхневої неоднорідності (тобто тіл, у яких область, де $\rho \approx \rho_*$, є значно більшою від області, де ρ істотно відрізняється від ρ_*). Виникає природне питання, яким чином врахувати зображений на рис. 1 дефект маси, а також, як розширити модель на опис тіл, характерний розмір яких є співмірним з областю приповерхневої неоднорідності.

Для врахування і пояснення зображеного на рис. 1 дефекту маси у третє з рівнянь системи (3) введено джерела маси σ_m . Іншим аргументом на користь джерел маси є геометрична неоднорідність поверхні реального твердого тіла. У механіці деформівного твердого тіла поверхню тіла моделюють кусково-гладкою геометрично ідеальною поверхнею, ігноруючи численні мікронеоднорідності. Схематичне зображення реальної поверхні тіла та її ідеалізовану модель показано на рис. 2а, рис. 2б відповідно. Величина та характер цих неоднорідностей залежить, перш за все, від способу формування поверхні тіла. Ідеалізована поверхня тіла (пунктирна лінія на рис. 2б), може бути вибрана між найвищою та найнижчою точками профілю поверхні на рис. 2а. Слід зазначити, що геометрична неоднорідність поверхні у тонких плівках може поширюватися на всю область тіла.

На основі аналізу рис. 2, враховуючи однорідний стан відлікового тіла, робимо висновок, що врахування геометричної неоднорідності поверхні

(мікроструктури поверхні) можна моделювати стоками (джерелами) маси у приповерхневій області тіла. При цьому інтенсивність джерел повинна загасати при відході у глибину тіла. Оскільки розглядаємо структурно стабільні тіла, то природно прийняти, що дефект маси виник у початковий момент часу (коли було утворене тіло, а саме – його поверхня). У зв'язку з цим для джерел маси приймемо

$$\sigma_m(\tau, \mathbf{r}) = d_{\sigma_m}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_s|)\delta(\tau),$$

де \mathbf{r} – радіус-вектор довільної точки тіла, \mathbf{r}_s – її проекція на геометрично ідеальну поверхню тіла, d_{σ_m} – деяка спадна функція свого аргументу.

Зрозуміло, що джерела маси повинні справджувати співвідношення

$$\int_{(V)} d_{\sigma_m} d\mathbf{r} = \int_{(V)} (\rho - \rho_*) d\mathbf{r}. \quad (17)$$

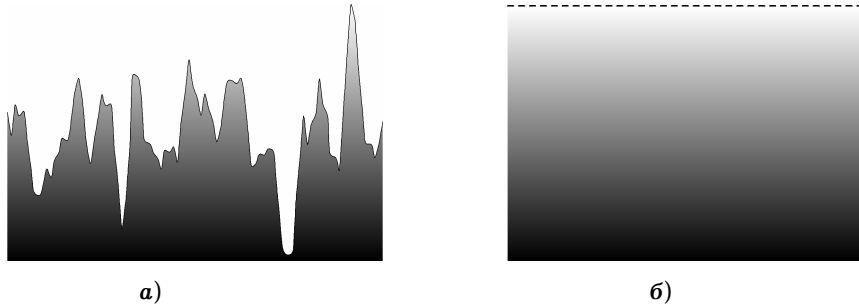


Рис. 2

Слід зазначити, що природа структурної неоднорідності матеріалу та приповерхневої неоднорідності, зумовленої джерелами маси, є принципово відмінною. У випадку приповерхневої неоднорідності таку неоднорідність будемо трактувати як змінну пористість. Для моделювання розподілу джерел маси приймаємо розв'язок для густини ρ у задачі без урахування джерел маси σ_m . Зазначимо також, що неідеальну форму поверхні враховують при побудові математичних моделей контактної взаємодії твердих тіл [8, 25]. При цьому розрізняють фізичну неоднорідність приповерхневих шарів і геометричну неоднорідність поверхні тіла (відхилення реальної границі тіла від її ідеальної форми).

Використаємо систему рівнянь (15) для дослідження напружено-деформованого стану півпростору. Будемо враховувати при цьому залежність модулів пружності від густини. Для цього використаємо одне з відомих подань модуля Юнга E та коефіцієнта Пуассона ν для пористого матеріалу [26]:

$$E = E_0 \alpha, \quad \nu = \nu_0 \alpha,$$

де E_0 , ν_0 – модуль Юнга та коефіцієнт Пуассона матеріалу тіла у відліковому стані, $\alpha = \rho/\rho_*$.

Використовуючи відомі співвідношення [7], що пов'язують сталі Ляме з модулем Юнга та коефіцієнтом Пуассона, для λ , μ запишемо

$$\lambda = \frac{\nu_0 E_0 \alpha^2}{(1 + \nu_0 \alpha)(1 - 2\nu_0 \alpha)}, \quad \mu = \frac{E_0 \alpha}{2(1 + \nu_0 \alpha)}. \quad (18)$$

3. Приповерхнева неоднорідність у півпросторі. Розглянемо пружний півпростір, що займає область $x \geq 0$ у декартовій системі координат $Oxyz$. Вважаємо, що поверхня півпростору $x = 0$ вільна від силового навантаження і на ній задано постійне значення густини ρ_a .

Для опису рівноважного стану тіла маємо рівняння рівноваги, рівняння сумісності деформацій, рівняння балансу маси, а також визначальні співвідношення, у яких характеристики матеріалу залежать від густини. Рівняння, що описує густину, у загальному випадку міститиме доданки, пропорційні до кульової складової тензора деформації. Якщо ж знехтувати впливом деформації на густину, то систему рівнянь, що описує рівноважний стан півпростору із урахуванням структурної неоднорідності матеріалу та геометричної неоднорідності поверхні, можемо записати у вигляді

$$\frac{d\sigma_{xx}}{dx} = 0,$$

$$\frac{d^2}{dx^2} \left(\frac{\sigma_{\gamma\gamma}}{2\mu} - \frac{\lambda\sigma}{2\mu(3\lambda + 2\mu)} \right) = -\frac{d^2}{dx^2} [a_m(\rho - \rho_*)], \quad \gamma = \{y, z\},$$

$$\frac{d^2(\rho - \rho_*)}{dx^2} - \xi_0^2(\rho - \rho_*) + \xi_0^2 d_m \exp(-\zeta_0 x) = 0,$$

де залежність модулів λ , μ від густини описується співвідношеннями (18),

$$\frac{1}{\xi_0^2} = g_{mm} \left[\alpha_{mm} - \frac{(3\lambda_0 + 2\mu_0)^2}{\lambda_0 + 2\mu_0} a_m^2 \right], \quad \lambda_0, \mu_0 - \text{сталі Ляме тіла у відліковому}$$

стані, $\sigma_{\alpha\alpha}$, $\alpha = \{x, y, z\}$, – компоненти тензора напружень. При цьому прийнято такий вираз для опису неоднорідності, пов'язаний із джерелами маси: $d_{\sigma m}(x) = d_m \exp(-\zeta_0 x)$.

До цієї системи рівнянь слід приєднати крайові умови на поверхні півпростору

$$\sigma_{xx} = 0, \quad \rho = \rho_a, \quad x = 0,$$

умову

$$\int_0^\infty d_{\sigma m} dx = \int_0^\infty (\rho - \rho_*) dx,$$

що відповідає співвідношенню (17), а також умову обмеженості розв'язку при $x \rightarrow \infty$.

Розв'язком сформульованої задачі є

$$\rho = \rho_* + (\rho_a - \rho_*) \left[\frac{\zeta_0}{\zeta_0 - \xi_0} \exp(-\xi_0 x) - \frac{\xi_0}{\zeta_0 - \xi_0} \exp(-\zeta_0 x) \right],$$

$$\theta = \theta_a, \quad \sigma_{xx} = 0, \quad \sigma_{yy} = \sigma_{zz} = -b_m(\rho - \rho_*),$$

де

$$b_m = 2\mu(\rho) \frac{3\lambda(\rho) + 2\mu(\rho)}{\lambda(\rho) + 2\mu(\rho)} a_m.$$

На рис. 3 показано розподіл густини ρ/ρ_* у півпросторі при таких значеннях параметрів: $\rho_a/\rho_* = 0.5$, $\zeta_0/\xi_0 = 0.2, 1.0, 5.0$. Порівнюючи характер кривих на рис. 1 та рис. 3, відмітимо істотну відмінність в околі поверхні тіла.

На рис. 4 зображено розподіл напружень $\sigma_p \equiv \sigma_{yy}/(b_{m0}\rho_*)$ у півпросторі

$$\text{при } \rho_a/\rho_* = 0.5, \quad \nu_0 = 0.3, \quad \zeta_0/\xi_0 = 0.2, 1.0, 5.0 \quad b_{m0} = 2\mu_0 \frac{3\lambda_0 + 2\mu_0}{\lambda_0 + 2\mu_0} a_m.$$

Штрих-пунктирною лінією показано розподіл напружень, обчислених при відсутності джерел маси та при сталих значеннях модулів пружності, власних тілу у відліковому стані.

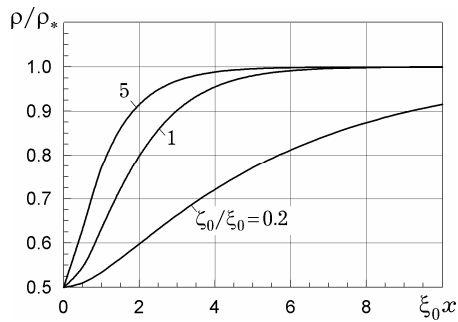


Рис. 3

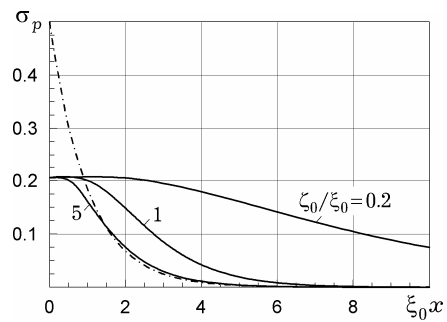


Рис. 4

Розподілам напружень та густини властиві два характерні розміри. Один з них, ξ_0^{-1} , пов'язаний із властивістю матеріалу, тоді як інший, ζ_0^{-1} , пов'язаний із властивістю реальної поверхні тіла. Величина відношення цих параметрів істотно впливає на характер розподілу густини та напружень у півпросторі. Врахування джерел маси та залежності модулів пружності від густини приводить до якісної та кількісної змін поведінки розглядуваних полів. У вільному від силового навантаження тілі виникають внутрішні напруження, які однозначно визначаються параметрами матеріалу та поверхні. Їх врахування є важливим при розрахунку експлуатаційних, у тому числі міцнісних, характеристик.

Висновки. На основі аналізу моделі локально градієнтного термопружного твердого тіла вказано на межі застосовності лінеаризованого наближення. Для розширення моделі та коректного опису поведінки деформівних твердих тіл, один з характерних розмірів яких є співмірним з областю приповерхневої неоднорідності, а також узгодження актуального та відлікового станів тіла, введено джерела маси та враховано залежність модулів пружності від густини. Джерела маси пов'язано з геометричною неоднорідністю реальної поверхні тіла. На основі розв'язку крайової задачі для півпростору показано, що розподілам напружень і густини властиві два характерні розміри. Один з них пов'язаний зі структурою матеріалу, тоді як інший – з геометричною неоднорідністю реальної поверхні тіла. Вказано на істотну якісну та кількісну відмінність одержаних результатів порівняно з лінеаризованою моделлю. Запропоноване розширення локально градієнтного підходу є важливим при моделюванні та дослідженні термопружної поведінки тонких плівок, волокон та інших нанoeлементів.

1. Бурак Я. И., Нагирный Т. С. Математическое моделирование локально-градиентных процессов в инерционных термомеханических системах // Прикл. механика. – 1992. – **28**, № 12. – С. 3–23.
Te same: *Burak Ya. I., Nagirnyi T. S. Mathematical modeling of local gradient processes in inertial thermomechanical systems // Int. Appl. Mech. – 1992. – 28, No. 12. – P. 775–793.*
2. Бурак Я., Чапля Є., Нагирний Т., Чекурін В., Кондрат В., Чернуха О., Мороз Г., Червінка К. Фізико-математичне моделювання складних систем / Під ред. Я. Бурака, Є. Чаплі. – Львів: Сполом, 2004. – 264 с.
3. Гленсдорф П., Пригожин И. Термодинамическая теория структуры, устойчивости и флуктуаций. – Москва: Мир, 1973. – 280 с.
Te same: *Glansdorff P., Prigogine I. Thermodynamics theory of structure, stability and fluctuations. – London: Wiley-Intersci., 1971. – 306 p.*
4. Гузь А. Н., Рушчицкий Я. Я. О построении основ механики нанокомпозитов (обзор) // Прикл. механика. – 2011. – **47**, № 1. – С. 4–61.
Te same: *Guz A. N. Rushchitsky J. J. Establishing foundations of the mechanics of nanocomposites (Review) // Int. Appl. Mech. – 2011. – 47, No. 1. – P. 2–44.*
5. Нагирный Т. С., Червінка К. А. Термодинамічні моделі та методи термомеханіки із врахуванням приповерхневої та структурної неоднорідностей. Основи наномеханіки I. – Львів: Сполом, 2012. – 264 с.

6. *Нагірний Т. С., Червінка К. А., Бойко З. В.* До вибору крайових умов у задачах локально градієнтного підходу в термомеханіці // *Мат. методи і фіз.-мех. поля*, – 2011. – **54**, № 3. – С. 199–206.
 The same: *Nahirnyj T. S., Chervinka K. A., Boiko Z. V.* On the choice of boundary conditions in problems of the local gradient approach in thermomechanics // *J. Math. Sci.* – 2012. – **186**, No. 1. – P. 130–138.
7. *Новауцький В.* Теорія пружості. – Москва: Мир, 1975. – 872 с.
8. *Adams G. G.* Adhesion at the wavy contact interface between two elastic bodies // *Trans. ASME. J. Appl. Mech.* – 2004. – **71**, No. 6. – P. 851–856.
9. *Askès H., Aifantis E. C.* Gradient elasticity in statics and dynamics: An overview of formulations, length scale identification procedures, finite element implementations and new results // *Int. J. Solids Struct.* – 2011. – **48**, No. 13. – P. 1962–1990.
10. *Askès H., Gitman I. M.* Review and critique of the stress gradient elasticity theories of Eringen and Aifantis // In: *Mechanics of Generalized Continua: One Hundred Years After the Cosserats* / G. A. Maugin, A. V. Metrikine (Eds.). – Ser. *Adv. in Mech. and Math.* Vol. 21. – New York: Springer-Verlag, 2010. – xix+338 p. – (Chap. 21. – P. 203–210).
11. *Aifantis E. C.* Exploring the applicability of gradient elasticity to certain micro/nano reliability problems // *Microsyst. Technol.* – 2009. – **15**, No. 1. – P. 109–115.
12. *Buryachenko V. A.* On thermoelastostatics of composites with nonlocal properties of constituents. I. General representations for effective material and field parameters // *Int. J. Solids Struct.* – 2011. – **48**, No. 13. – P. 1818–1828.
13. *Bazant Z. P.* Scaling of structural strength. – London: Elsevier, 2005. – xii+327 p.
14. *Bazant Z. P., Jirásek M.* Nonlocal integral formulations of plasticity and damage: Survey of progress // *J. Eng. Mech.-ASCE.* – 2002. – **128**, No. 11. – P. 1119–1149.
15. *Geers M. G. D., Kouznetsova V. G., Brekelmans W. A. M.* Multi-scale computational homogenization: Trends and challenges // *J. Comput. Appl. Math.* – 2010. – **234**, No. 7. – P. 2175–2182.
16. *Ghoniem N. M., Busso E. P., Kioussis N., Huang H.* Multiscale modelling of nano-mechanics and micromechanics: An overview // *Phil. Mag.* – 2003. – **83**, No. 31–34. – P. 3475–3528.
17. *Guo J.-G., Zhao Y.-P.* The size-dependent elastic properties of nanofilms with surface effects // *J. Appl. Phys.* – 2005. – **98**, No. 7. – 074306. – 11 p.
18. *Nahirnyj T., Tchervinka K.* Interface phenomena and interaction energy at the surface of electroconductive solids // *Comput. Meth. Sci. Technol.* – 2008. – **14**, No. 2. – P. 105–110.
19. *Maugin G. A.* Nonlocal theories or gradient-type theories: A matter of convenience? // *Arch. Mech.* – 1979. – **31**, No. 1. – P. 15–26.
20. *Paola M. D., Failla G., Zingales M.* The mechanically-based approach to 3D non-local linear elasticity theory: Long-range central interactions // *Int. J. Solids Struct.* – 2010. – **47**, No. 18–19. – P. 2347–2358.
21. *Polizzotto C.* Unified thermodynamic framework for nonlocal/gradient continuum theories // *Eur. J. Mech. A-Solid.* – 2003. – **22**, No. 5. – P. 651–668.
22. *Polizzotto C., Fuschi P., Pisano A. A.* A strain-difference-based nonlocal elasticity model // *Int. J. Solids Struct.* – 2004. – **41**, No. 9–10. – P. 2383–2401.
23. *Sansour C., Skatulla S.* A strain gradient generalized continuum approach for modelling elastic scale effects // *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.* – 2009. – **198**, No. 15–16. – P. 1401–1412.
24. *Schmauder S., Mishnaevsky L. (Jr.)* Micromechanics and nanosimulation of metals and composites: Advanced methods and theoretical concepts. – Berlin-Heidelberg: Springer-Verlag, 2009. – xv+420 p.
25. *Shvets R. M., Martynyak R. M., Kryshchak A. A.* Discontinuous contact of an anisotropic half-plane and a rigid base with disturbed surface // *Int. J. Eng. Sci.* – 1996. – **34**, No. 2. – P. 183–200.
26. *Ursenbach C. P.* Simulation of elastic moduli for porous materials // *CREWES Res. Rep.* – 2001. – **13**. – P. 83–98.
27. *Wang Y. M., Ma E.* Mechanical properties of bulk nanostructured metals // In: *Bulk nanostructured materials* / M. J. Zehetbauer, Y. T. Zhu (Eds.). – Weinheim: Wiley-VCH, 2009. – 736 p. – (Chap. 19. – P. 425–453).
28. *Zaoui A.* Continuum micromechanics: Survey // *J. Eng. Mech.-ASCE.* – 2002. – **128**, No. 8. – P. 808–816.

ИСТОЧНИКИ МАССЫ И МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРИПОВЕРХНОСТНОЙ НЕОДНОРОДНОСТИ В ДЕФОРМИРУЕМЫХ ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ

Предложен подход к описанию термоупругих процессов в деформируемых твердых телах с учетом структурной неоднородности материала и геометрической неоднородности поверхности тела. При формулировании основных соотношений использованы методы термодинамики неравновесных процессов и нелинейной механики сплошной среды. Структура материала учтена введением необратимой составляющей вектора потока массы, а геометрическая неоднородность поверхности тела – введением источников массы, моделирующих ее свойства, а также зависимостью характеристик материала, включая модули упругости, от плотности. Изучено равновесное состояние полупространства. Показано, что распределения напряжений и плотности свойственны два характерных размера, один из которых связан со структурной неоднородностью материала, а другой – с геометрической неоднородностью реальной поверхности тела. Обсуждены границы применимости локально градиентного подхода в линеаризованном приближении.

MASS SOURCES AND MODELING NEAR-SURFACE HETEROGENEITY IN SOLIDS

An approach to the description of thermoelastic processes in deformable solids taking into account the structural heterogeneity of material and the geometrical heterogeneity of the body surface is proposed. The methods of nonequilibrium thermodynamics and mechanics of solids are used to formulate the basic relationships. The structure of the material is modeled by the irreversible component of mass flux vector. The geometric heterogeneity of body surface is modeled by the introduction of mass sources, simulating its properties, and by taking into account the dependence of the characteristics of the material, including the modules of elasticity, on the mass density. The equilibrium state of half-space are studied. It is shown that the distributions of stresses and density are characterized by two typical sizes, one of which is related to the structural heterogeneity of the material, and the other is related with the geometrical heterogeneity of the real body surface. The scope of applicability of local gradient approach in the linearized approximation are discussed.

¹ Центр мат. моделювання
Ин-ту прикл. проблем механіки і математики
ім. Я. С. Підстригача НАН України, Львів,
² Зеленогур. ун-т, Зелена Ґура, Польща,
³ Львів. нац. ун-т імені Івана Франка, Львів

Одержано
20.11.13