

12. *Ройтбурд Л. А.* Теория деформирования гетерофазной структуры при фазовых превращениях в твердом состоянии.— УФН, 1974, 10, № 1, с. 69—104.
13. *Седов Л. И.* Механика сплошной среды. Т. 1. М., «Наука», 1973. 535 с.
14. *Френкель Я. И.* Кинетическая теория жидкостей. Л., «Наука», 1975. 592 с.

Львовский филиал математической физики
Института математики АН УССР

Поступила в редколлегию
16.X 1976 г.

УДК 532.72 : 532.135

В. С. Павлина

О ВЗАИМОДЕЙСТВИИ ПРОЦЕССОВ ДЕФОРМАЦИИ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ЯВЛЕНИЙ В УПРУГОВЯЗКИХ ТЕЛАХ

Материалы деталей машин, аппаратов современной техники находятся, как правило, в сложных условиях эксплуатации и их прочность, деформативность и во многих случаях не менее важный строго определенный химический состав (распределение компонент, фаз и т. п.) зависят от действия всей совокупности таких факторов, как механические нагрузки, повышенные температуры, агрессивные среды и т. п. Это означает, что деформация и разрушение материалов определяются не только приложенными нагрузками, но являются следствием происходящих в них сложных физико-химических процессов, а интенсивность и даже существование последних в значительной степени зависят от уровня и вида механических усилий. Поэтому если раньше механика деформируемого тела при решении практически важных задач ограничивалась сравнительно простыми представлениями относительно его свойств, то теперь речь должна идти об усложнении и усовершенствовании исследуемых моделей. Дальнейшее развитие в этом направлении, в особенности разработка теории процесса деформирования, в первую очередь связано с привлечением физических представлений о внутреннем состоянии твердых тел и свойственных им необратимых процессов.

Построение моделей деформируемых тел с учетом физико-химических явлений целесообразно производить на основании методов механики сплошной среды [7] и положений неравновесной термодинамики [1]. Взаимосвязанная система уравнений для описания процесса деформации, теплопроводности и диффузии с учетом химических реакций для идеальных жидкостей на основании такого подхода получена в работе [8]. Автором [3] проведен некоторый анализ исходных положений о деформации тел при наличии химических превращений. Исследованию взаимовлияния процессов деформации и химических реакций в упруговязком теле (модель Максвелла) посвящена работа [2]. Формулировка краевой задачи для упруговязких тел с учетом диффузии и теплопроводности осуществлена в работе [6]. В данной статье приведены соответствующие результаты для случая многокомпонентной диффузии и наличия химических реакций.

Рассмотрим n_1 -компонентный твердый раствор, в котором происходят $N \leq n_1$ химических реакций (реакций взаимного превращения). Для этой модели введем параметры: σ_{ij} , p_{ij} и e_{ij} , ϵ_{ij} — компоненты тензоров суммарных (вязких + упругих), упругих напряжений и деформаций соответственно; T и S — температура и энтропия; μ^k и c^k — химический потенциал и концентрация k -компоненты растворенного вещества ($k = 1, 2, \dots, n_1$). Постулируем, что термодинамическое состояние модели определяется компонентами тензоров p_{ij} или ϵ_{ij} и величинами μ^k , T или c^k , S . Поэтому для внутренней энергии U как функции состояния упруговязкого твердого раствора имеем

$$U = U(\epsilon_{ij}, S, c), \quad c = (c^1, c^2, \dots, c^{n_1}) \quad (1)$$

и на основании соотношения Гиббса получаем

$$\rho U = T\rho S + \frac{1}{\rho} \rho_{\alpha\beta} \rho e_{\alpha\beta} + \mu^k \rho c^k, \quad (2)$$

где $\rho a \equiv \frac{da}{d\tau}$, τ — время.

Законы сохранения энергии, массы, линейного и углового импульсов в данном случае записываем в виде

$$\rho U = \frac{1}{\rho} \sigma_{\alpha\beta} \rho e_{\alpha\beta} - q_{\alpha,\alpha}, \quad (3)$$

$$\rho \rho c^k = -I_{\alpha,\alpha}^k + v_{kl} J^l, \quad (4)$$

$$\bar{\sigma}_{\alpha i,\alpha} = \rho \rho^2 u_i, \quad \sigma_{ij} = \sigma_{ji}. \quad (5)$$

Здесь q_i и I_i^k — компоненты векторов потоков тепла и массы k -компоненты; $v_{kl} J^l$ — образование компоненты k на единицу объема в l -й химической реакции; v_{kl} связано со стехиометрическим коэффициентом; J^l — скорость l -й химической реакции; ρ — плотность среды; $a_{,i} \equiv \frac{da}{dx_i}$.

При условии

$$\sigma_{ij} = p_{ij} \quad (6)$$

имеем упруговязкое тело Максвелла; условие

$$e_{ij} = \varepsilon_{ij} \quad (7)$$

соответствует модели Фохта. В обоих случаях принимаем, что выполняется равенство

$$e_{ij} = \frac{1}{2} (u_{i,j} + u_{j,i}). \quad (8)$$

Соотношения (2) — (4), (6) и (7) позволяют на основании положения классической неравновесной термодинамики определить термодинамические силы и потоки и записать с учетом теоремы Кюри кинетические уравнения модели. В случае изотропного тела в пренебрежении теплотой переноса диффузионным потоком для q_i и I_i^k получим

$$q_i = -\lambda T_{,i}, \quad I_i^k = -L_{kl} v_{,i}^k, \quad (9)$$

где λ — коэффициент теплопроводности; L_{kl} — кинетические коэффициенты переноса массы. Скорость химической реакции и процессы вязкости, описываемые соответственно тензорами нулевого (J^k) и второго (J) рангов, выражаются следующим образом:

$$J^k = \mathcal{L}_{kl} X^l + \frac{1}{3} \mathcal{L}_{kB} \text{Sp } X, \quad (10)$$

$$J = \frac{1}{2G_B} X - \left(\frac{1}{6G_B} - \frac{1}{9K_B} \right) \text{Sp } XI + \frac{1}{3} \mathcal{L}_{Bl} X^l I. \quad (11)$$

Здесь введены обозначения: \mathcal{L}_{kl} , \mathcal{L}_{Bk} , \mathcal{L}_{kB} , G_B , K_B — кинетические коэффициенты, $X^l = -v_{ik} v_{,i}^k$ — термодинамическая сила, соответствующая потоку J^l , I — единичный тензор второго ранга. В случае модели Максвелла

$$J = \rho (e_{ij} - \varepsilon_{ij}), \quad X = \frac{1}{\rho} \sigma_{ij} \quad (12)$$

и в случае модели Фохта

$$J = \rho e_{ij}, \quad X = \frac{1}{\rho} (\sigma_{ij} - p_{ij}). \quad (13)$$

Введенные кинетические коэффициенты удовлетворяют соотношениям взаимности Онзагера

$$L_{kl} = L_{lk}, \quad \mathcal{L}_{kl} = \mathcal{L}_{lk}, \quad \mathcal{L}_{kB} = \mathcal{L}_{Bk}. \quad (14)$$

В предположении о малых возмущениях состояния системы и на основании соотношения Гиббса получаем

$$p_{ij} = 2G\varepsilon_{ij} + \left(K^{T,c} - \frac{2}{3} G \right) \varepsilon_{\alpha\alpha} \delta_{ij} - K^{T,c} (\beta_k^{\sigma,T} c^k + \beta_T^{\sigma,c} t) \delta_{ij}, \quad (15)$$

$$s_1 = \frac{C^{e,c}}{T} t + \frac{1}{\rho} K^{T,c} \beta_T^{\sigma,c} \varepsilon_{\alpha\alpha} - d_{i,T}^{e,c} c^i, \quad (16)$$

$$\mu^k = d_{ki}^{e,T} c^i + d_{k,T}^{e,c} t - \frac{1}{\rho} K^{T,c} \beta_k^{\sigma,T} \varepsilon_{\alpha\alpha}. \quad (17)$$

Здесь введены обозначения [5]: $K^{T,c}$, G — упругие модули; $\beta_k^{\sigma,T}$, $\beta_T^{\sigma,c}$ — концентрационный (компоненты k) и температурный коэффициенты объемного расширения; $C^{e,c}$ — удельная теплоемкость; $d_{ki}^{e,c}$ и $d_{k,T}^{e,c}$ — коэффициенты, характеризующие зависимость химического потенциала k -компоненты от концентрации l -компоненты и температуры; $t = T - T_0$, $s_1 = S - S_0$, T_0 , S_0 — начальные значения температуры и энтропии. Для упрощения принято, что $\mu_0^k = 0$, $c_0^k = 0$, $p_{ij}^0 = 0$, $\varepsilon_{ij}^0 = 0$.

На основании выражений (11) — (13) и с учетом соотношений (15) — (17) связь между σ_{ij} и e_{ij} можно представить в виде

$$\sigma_{ij} = 2G^* e_{ij} + \left(K^* - \frac{2}{3} G^* \right) e_{\alpha\alpha} \delta_{ij} - K^* (\beta_i^* c^i + \beta_t^* t) \delta_{ij}. \quad (18)$$

В случае модели Максвелла введенные здесь модули-операторы и аналоги модулей упругости определяются так:

$$G^* = \frac{np}{1+np} G, \quad K^* = \frac{mp}{1+mp} K^{T,c}, \quad m = \frac{K_{B\theta}}{K^{T,c} (1 + K_B \mathcal{L}_{Bl} \gamma_{lk} \beta_k^{\sigma,T})},$$

$$\beta_k^* = \beta_k^{\sigma,T} - \mathcal{L}_{Br} \nu_{rl} d_{lk}^{\sigma,T} \frac{1}{\rho}, \quad \beta_t^* = \beta_T^{\sigma,c} - \mathcal{L}_{Br} \nu_{rl} d_{lt}^{\sigma,c} \frac{1}{\rho}, \quad n = \frac{G_{B\theta}}{G}, \quad (19)$$

а в случае модели Фохта —

$$G^* = (1 + np) G, \quad K^* = (1 + mp) K, \quad K = K^{T,c} (1 - K_B \mathcal{L}_{Bl} \nu_{lk} \beta_k^{\sigma,T}), \quad m = \frac{K_{B\theta}}{K},$$

$$\beta_k^* = \frac{1}{K^*} (K^{T,c} \beta_k^{\sigma,T} - K_{B\theta} \mathcal{L}_{Bl} \nu_{lk} d_{lk}^{\sigma,T}), \quad \beta_t^* = \frac{1}{K^*} (K^{T,c} \beta_T^{\sigma,c} - K_{B\theta} \mathcal{L}_{Bl} \nu_{lk} d_{lt}^{\sigma,c}),$$

$$n = \frac{G_{B\theta}}{G}. \quad (20)$$

Уравнения сохранения и полученные кинетические уравнения описывают в общем случае процессы деформации, теплопроводности, диффузии и химических превращений в упруговязких телах. Для нахождения определяемых при изучении таких систем величин концентрации растворенных веществ, температуры, компонент вектора перемещений (компонент тензоров суммарных напряжений или деформаций) получаем при линеаризации систему взаимосвязанных дифференциальных уравнений: уравнения движения

$$G^* u_{i,\alpha\alpha} + \left(K^* + \frac{1}{3} G^* \right) u_{\alpha,\alpha i} - K^* (\beta_i^* c_{,i} + \beta_t^* t_{,i}) = \rho p^2 u_i, \quad (21)$$

уравнения диффузии и теплопроводности

$$\rho c^i = D_{lk}^{\sigma, \alpha\alpha} c_{,i}^k + D_{l,\sigma} \sigma_{\alpha\alpha, \beta\beta} + D_{i,T}^{\sigma, \alpha\alpha} t_{,i} - \gamma_{lk}^{\sigma} c^k - \gamma_{i,T}^{\sigma} t - \gamma_{l,\sigma} \sigma_{\alpha\alpha}, \quad (22)$$

$$\rho t + \tau_{\sigma\rho} \sigma_{\alpha\alpha} + \tau_i^{\sigma} \rho c^i = \kappa_{\sigma t, \alpha\alpha} - \gamma_{\sigma} \sigma_{\alpha\beta}^2 - \gamma_{\sigma} \sigma_{\alpha\alpha}^2 \quad (23)$$

в случае модели Максвелла и

$$\rho c^k = D_{kl}^e c_{,i}^l + D_{k,T}^e t_{,i} + D_{k,e} e_{\beta\beta, \alpha\alpha} - \gamma_{kl}^e c^l - \gamma_{k,T}^e t - \gamma_{k,e} e_{\alpha\alpha} - \gamma_{k,e}^e p e_{\alpha\alpha}, \quad (24)$$

$$\rho t + \tau_e p e_{\alpha\alpha} + \tau_i^e \rho c^i = \kappa_e t_{,i} - \gamma_e (p e_{\alpha\beta})^2 - \gamma_e^e (p e_{\alpha\alpha})^2 \quad (25)$$

в случае модели Фохта. Здесь введены обозначения:

$$\begin{aligned}
 D_{kl}^{\sigma} &= \frac{1}{\rho} L_{kr} d_{rl}^{\sigma, T}, \quad D_{k, T}^{\sigma} = \frac{1}{\rho} L_{kl} d_{l, T}^{\sigma, c}, \quad D_{k, \sigma} = -\frac{1}{3\rho^2} L_{kl} \beta_l^{\sigma, T}, \\
 \gamma_{kl}^{\sigma} &= \frac{1}{\rho} v_{kl} \mathcal{L}_{ls} v_{sr} d_{rl}^{\sigma, T}, \quad \gamma_{k, T}^{\sigma} = \frac{1}{\rho} v_{kr} \mathcal{L}_{rs} v_{sl} d_{l, T}^{\sigma, c}, \\
 \gamma_{k, \sigma} &= \frac{1}{3\rho^2} v_{kl} (\mathcal{L}_{lr} v_{rs} \beta_s^{\sigma, T} + \mathcal{L}_{lB}), \\
 \tau_{\sigma} &= \frac{T \beta_T^{\sigma, c}}{3\rho C^{\sigma, c}}, \quad \tau_l^{\sigma} = \frac{\mu^l - T d_{l, T}^{\sigma, c}}{C^{\sigma, c}}, \quad \kappa_{\sigma} = \frac{\lambda}{C^{\sigma, c}}, \\
 \gamma_{\sigma} &= \frac{1}{2\rho^2 G_B C^{\sigma, c}}, \quad \gamma_{\sigma}^{\prime\prime} = \frac{1}{\rho^2 C^{\sigma, c}} \left(\frac{1}{6G_B} - \frac{1}{9K_B} \right); \\
 D_{kl}^e &= \frac{1}{\rho} L_{kr} d_{rl}^{e, T}, \quad D_{k, T}^e = \frac{1}{\rho} L_{kl} d_{l, T}^{e, c}, \quad D_{k, l} = -\frac{1}{\rho^2} L_{kl} K^{T, c} \rho_l^{\sigma, T}, \\
 \gamma_{kl}^e &= \frac{1}{\rho} v_{kr} (\mathcal{L}_{rl} - K_B \mathcal{L}_{rB} \mathcal{L}_{Bl}) v_{ls} d_{sl}^{e, T}, \quad \gamma_{k, T}^e = \frac{1}{\rho} v_{kr} (\mathcal{L}_{rl} - K_B \mathcal{L}_{rB} \mathcal{L}_{Bl}) v_{rl} d_{l, T}^{e, c}, \\
 \gamma_{k, e}^e &= \frac{1}{\rho^2} v_{kr} (\mathcal{L}_{rl} - K_B \mathcal{L}_{rB} \mathcal{L}_{Bl}) v_{ls} K^{T, c} \rho_s^{\sigma, T}, \quad \gamma_{k, e}^{\prime\prime} = \frac{1}{\rho} v_{kr} \mathcal{L}_{rB} K_B, \\
 \tau_e &= \frac{T}{\rho C^{e, c}} K^{T, c} \rho_T^{\sigma, c}, \quad \tau_l^e = \frac{\mu^l - T d_{l, T}^{e, c}}{C^{e, c}}, \\
 \kappa_e &= \frac{\lambda}{C^{e, c}}, \quad \gamma_e^{\prime} = \frac{2G_B}{C^{e, c}}, \quad \gamma_e^{\prime\prime} = \frac{1}{C^{e, c}} \left(K_B - \frac{2}{3} G_B \right).
 \end{aligned}$$

Для постановки задачи о поведении исследуемых моделей при действии механических нагрузок и в условиях нагрева и массообмена кроме уравнений (21)—(25) необходимо еще задание начальных и граничных условий. Для механических величин их можно задавать аналогично теории упругости. Условия тепло-массообмена тела с внешней средой (температура t_c , химические потенциалы диффундирующих веществ μ_c^k) определяем на основании выражений (9) [4]:

$$\frac{\partial t}{\partial n} + h(t - t_c) = 0, \quad \frac{\partial \mu^k}{\partial n} + H_{kl}(\mu^l - \mu_c^l) = 0, \quad (26)$$

где n — нормаль к ограничивающей поверхности тела; h, H_{kl} — коэффициенты тепло-массообмена.

ЛИТЕРАТУРА

1. Гроот С. де, Мазур П. Неравновесная термодинамика. М., «Мир», 1964. 456 с.
2. Кыялбаев Д. А. О влияния химических превращений на напряженное и деформированное состояние.— Сборник трудов Ленингр. ин-та инж. ж.-д. транспорта, 1971, вып. 326, с. 169—175.
3. Никольский С. С. Термодинамика механо-химических процессов в упругих телах.— ЖФХ, 1973, 47, № 4, с. 171—176.
4. Підстригач Я. С. Умови теплового контакту твердих тіл.— Допов. АН УРСР, 1963, № 7, с. 874—877.
5. Підстригач Я. С., Павлина В. С. Загальні співвідношення термодинаміки твердих розчинів.— УФЖ, 1961, 6, № 5, с. 655—663.
6. Подстригач Я. С., Павлина В. С. Диффузионные процессы в упруговязком деформируемом теле.— Прикл. механика, 1974, 10, № 5, с. 47—53.
7. Седов Л. И. Введение в механику сплошных сред. М., Физматгиз, 1965. 601 с.
8. Gurtin M. E., Vargas A. S. On the classical theory of reacting fluid mixtures.— Arch. Rat. Mech. and Anal., 1971, 43, N 3, p. 179—197.

Физико-механический институт
АН УССР

Поступила в редколлегию
20.VIII 1976 г.