

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:  $\sigma_{ij}$ ,  $p_{ij}$  и  $e_{ij}$ ,  $\epsilon_{ij}$  — компоненты тензоров суммарных (вязких + упругих), упругих напряжений и деформаций соответственно;  $T$  и  $S$  — температура и энтропия;  $\mu^k$  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  $\epsilon_{ij}$  и величинами  $\mu^k$ ,  $T$  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

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

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

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

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

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

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

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;  $\rho$  — 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  $\lambda$  — 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  $\sigma_{ij}$  и  $e_{ij}$  можно представить в виде

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

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

$$G^* = \frac{np}{1+np}G, \quad K^* = \frac{mp}{1+mp}K^{T,c}, \quad m = \frac{K_{B^0}}{K^{T,c}(1 + K_B \mathcal{L}_{Bl} \gamma_{lk} \beta_k^{\sigma,T})},$$

$$\beta_k^* = \beta_k^{\sigma,T} - \mathcal{L}_{Br} \nu_{rl} d_{lk}^{\sigma,T} \frac{1}{\rho}, \quad \beta_t^* = \beta_T^{\sigma,c} - \mathcal{L}_{Br} \nu_{rl} d_{lt}^{\sigma,c} \frac{1}{\rho}, \quad n = \frac{G_{B^0}}{G}, \quad (19)$$

а в случае модели Фохта —

$$G^* = (1+np)G, \quad K^* = (1+mp)K, \quad K = K^{T,c}(1 - K_B \mathcal{L}_{Bl} \nu_{lk} \beta_k^{\sigma,T}), \quad m = \frac{K_{B^0}}{K},$$

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

$$n = \frac{G_{B^0}}{G}. \quad (20)$$

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

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

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

в случае модели Максвелла и

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

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

в случае модели Фохта. Здесь введены обозначения:

$$\begin{aligned}
 D_{kl}^{\sigma} &= \frac{1}{\rho} L_{kr} d_{rl}^{\sigma, T}, \quad D_{k, T}^{\sigma} = \frac{1}{\rho} L_{kl} d_{l, T}^{\sigma, c}, \quad D_{k, \sigma} = -\frac{1}{3\rho^2} L_{kl} \beta_l^{\sigma, T}, \\
 \gamma_{kl}^{\sigma} &= \frac{1}{\rho} v_{kl} \mathcal{L}_{ls} v_{sr} d_{rl}^{\sigma, T}, \quad \gamma_{k, T}^{\sigma} = \frac{1}{\rho} v_{kr} \mathcal{L}_{rs} v_{sl} d_{l, T}^{\sigma, c}, \\
 \gamma_{k, \sigma} &= \frac{1}{3\rho^2} v_{kl} (\mathcal{L}_{lr} v_{rs} \beta_s^{\sigma, T} + \mathcal{L}_{lB}), \\
 \tau_{\sigma} &= \frac{T \beta_T^{\sigma, c}}{3\rho C^{\sigma, c}}, \quad \tau_l^{\sigma} = \frac{\mu^l - T d_{l, T}^{\sigma, c}}{C^{\sigma, c}}, \quad \kappa_{\sigma} = \frac{\lambda}{C^{\sigma, c}}, \\
 \gamma'_{\sigma} &= \frac{1}{2\rho^2 G_B C^{\sigma, c}}, \quad \gamma''_{\sigma} = \frac{1}{\rho^2 C^{\sigma, c}} \left( \frac{1}{6G_B} - \frac{1}{9K_B} \right); \\
 D_{kl}^e &= \frac{1}{\rho} L_{kr} d_{rl}^{e, T}, \quad D_{k, T}^e = \frac{1}{\rho} L_{kl} d_{l, T}^{e, c}, \quad D_{k, l} = -\frac{1}{\rho^2} L_{kl} K^{T, c} \beta_l^{\sigma, T}, \\
 \gamma_{kl}^e &= \frac{1}{\rho} v_{kr} (\mathcal{L}_{rl} - K_B \mathcal{L}_{rB} \mathcal{L}_{Bl}) v_{ls} d_{sl}^{e, T}, \quad \gamma_{k, T}^e = \frac{1}{\rho} v_{kr} (\mathcal{L}_{rl} - K_B \mathcal{L}_{rB} \mathcal{L}_{Bl}) v_{rl} d_{l, T}^{e, c}, \\
 \gamma_{k, e}^e &= \frac{1}{\rho^2} v_{kr} (\mathcal{L}_{rl} - K_B \mathcal{L}_{rB} \mathcal{L}_{Bl}) v_{ls} K^{T, c} \beta_s^{\sigma, T}, \quad \gamma_{k, e}'' = \frac{1}{\rho} v_{kr} \mathcal{L}_{rB} K_B, \\
 \tau_e &= \frac{T}{\rho C^{e, c}} K^{T, c} \beta_T^{\sigma, c}, \quad \tau_l^e = \frac{\mu^l - T d_{l, T}^{e, c}}{C^{e, c}}, \\
 \kappa_e &= \frac{\lambda}{C^{e, c}}, \quad \gamma_e' = \frac{2G_B}{C^{e, c}}, \quad \gamma_e'' = \frac{1}{C^{e, c}} \left( K_B - \frac{2}{3} G_B \right).
 \end{aligned}$$

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  $\mu_c^k$ ) 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 влиянии 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.