УДК 539.3

ФИЗИЧЕСКОЕ СОДЕРЖАНИЕ КАЛИБРОВОЧНОЙ МОДЕЛИ, ОПИСЫВАЮЩЕЙ СРЕДЫ СО СТРУКТУРОЙ И ДЕФЕКТАМИ

Ю. В. Гриняев, Н. В. Чертова

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, 634055 Томск

На основе связи основных геометрических представлений, динамических уравнений традиционных теорий упругих сред с микроструктурой и континуальной теории дефектов установлена возможность единого описания сред со структурой и сред с дефектами. Предложена идеализированная схема представления полной деформации в материале с дефектами.

Введение. Для теоретического прогнозирования поведения материалов при различных внешних воздействиях наиболее актуально построение моделей, адекватно описывающих неупругое поведение материалов. По современным представлениям неупругая деформация твердых тел существенно неоднородна, т. е. среда в процессе деформирования представляет собой совокупность областей с различным характером и степенью деформации. Область однородной деформации есть отдельный элемент структуры. В этом смысле все реальные твердые тела в процессе деформирования являются средой со структурой, масштаб которой определяется различными структурными особенностями среды, например распределением концентраторов напряжений. Наличие структуры предполагает существование дефектов в виде границ раздела структурных элементов. Традиционно отдельные аспекты неупругого поведения, связанные со структурой материала и дефектами, рассматривались независимо в континуальной теории дефектов [1, 2] и теориях упругих сред со структурой [3, 4]. Континуальная теория дефектов до недавнего времени не содержала динамики. В рамках этого подхода можно было рассчитывать поля деформаций и напряжений при заданной плотности дефектов. Привлечение калибровочных теорий поля [5, 6] позволило построить замкнутую систему динамических уравнений упругого тела с дефектами. Среды со структурой в рамках калибровочного подхода в литературе не описывались, что определяет актуальность настоящей работы.

1. Математический формализм построения калибровочной теории. Впервые калибровочные теории были использованы для описания деформации твердых тел с дефектами в работах [5, 6], где подробно изложен математический аппарат калибровочного описания и показано, что на основе нелинейного лагранжиана упругого тела могут быть построены динамические модели упругого тела с дислокациями, дисклинациями и дефектами обоих типов. В дальнейшем в качестве первого приближения рассматривается линейная модель упругого тела с дислокациями. Процедура построения калибровочной модели состоит в том, что записывается лагранжиан линейной теории упругости для однородного изотропного тела

$$L = \int dV \Big[\frac{\rho}{2}\,\frac{\partial u_i}{\partial t}\,\frac{\partial u_i}{\partial t} - \frac{\mu}{2}\Big(\frac{\partial u_i}{\partial x_j}\,\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j}\,\frac{\partial u_j}{\partial x_i}\Big) - \frac{\lambda}{2}\,\frac{\partial u_i}{\partial x_i}\,\frac{\partial u_j}{\partial x_j}\Big] \qquad (1.1)$$

(u_i — компоненты вектора упругих смещений; λ, μ — коэффициенты Ламе; ρ — плотность среды) и определяется его калибровочная группа. Исходный лагранжиан (1.1) инвариантен относительно однородных трансляций

$$\tilde{u}_i(x,t) = u_i(x,t) + a_i, \tag{1.2}$$

что соответствует перемещению упругого тела как целого. Локализация группы трансляции

$$\tilde{u}_i(x,t) = u_i(x,t) + a_i(x,t) \tag{1.3}$$

нарушает инвариантность (1.1), поскольку появляются добавочные члены, связанные с дифференцированием параметров группы $a_i(x,t)$. Процедура минимальной замены, при которой обычные производные заменяются удлиненными:

$$\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \to D_j u_i = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \beta_{ji}, \qquad \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial t} \to D_0 u_i = \frac{\partial u_i}{\partial t} + V_i, \tag{1.4}$$

восстанавливает инвариантность (1.1) при неоднородных преобразованиях (1.3):

$$L_1 = \int dV \Big[\frac{\rho}{2}\, D_0 u_i D_0 u_i - \frac{\mu}{2}\,(D_j u_i D_j u_i + D_j u_i D_i u_j) - \frac{\lambda}{2}\, D_i u_i D_j u_j\Big]. \tag{1.5}$$

При замене (1.4) появляются новые калибровочные или компенсирующие поля β_{ji}, V_i, с которыми, согласно [5], связана дополнительная кинетическая и потенциальная энергия, определяющая лагранжиан калибровочных полей

$$L_2 = \int dV \Big[\frac{B}{2}\, I_{ij} I_{ij} - \frac{S}{2}\, \alpha_{ij}\alpha_{ij}\Big] \tag{1.6}$$

как функцию величин

$$I_{ij} = \frac{\partial V_j}{\partial x_i} - \frac{\partial \beta_{ij}}{\partial t}, \qquad \alpha_{ij} = e_{ikl}\,\frac{\partial \beta_{lj}}{\partial x_k}, \tag{1.7}$$

где B, S — новые константы теории. Рассмотренная выше процедура построения калибровочной теории не раскрывает физического содержания модели. Чтобы решить эту задачу, проведем анализ полной деформации в рамках континуальной теории дефектов, поскольку локализация группы трансляции (1.3) в точке (x,t) соответствует введению единичной дислокации Вольтерра, а функциональная зависимость от координат определяет усредненное распределение дефектов [2, 7].

2. Схема представления полной деформации в континуальной теории дефектов. Полная деформация в материале с дефектами может быть представлена в виде суммы трех слагаемых, известных в континуальной теории дефектов:

$$u^{tot}_{(i,j)} = u^{el}_{(i,j)} + u^{el-pl.D}_{(i,j)} + u^{c.pl}_{(i,j)}, \tag{2.1}$$

каждое из которых представляет симметричную часть градиента непрерывного вектора смещений. Индексы в круглых скобках обозначают симметрирование, а запятая — производную по координате. Первое слагаемое в правой части (2.1) соответствует упругой деформации, связанной с внешними нагрузками, которая при снятии их исчезает со скоростью звуковых волн. Второе слагаемое определяет совместную упругопластическую деформацию, обусловленную дефектами материала. Как принято в континуальной теории дислокаций [1, 2], градиент $u^{el-pl.D}$ представляет собой сумму упругой и пластической дисторсий

$$u^{el-pl.D}_{i,j} = \beta^{el.D}_{ji} + \beta^{pl.D}_{ji}, \tag{2.2}$$

каждая из которых не является градиентом непрерывного вектора смещений. По определению произвольно заданной пластической дисторсии $\beta^{pl.D}_{ji}$ соответствует плотность дислокаций $\alpha_{ij} = -e_{ikl}\,\partial\beta_{lj}^{pl.D}/\partial x_k$, а упругая дисторсия $\beta_{ji}^{el.D}$ определяет искажения тела, которые обеспечивают его сплошность при данной плотности дислокаций:

$$e_{ikl}\frac{\partial}{\partial x_k}u_{l,j}^{el-pl.D} = e_{ikl}\frac{\partial}{\partial x_k}(\beta_{lj}^{el.D} + \beta_{lj}^{pl.D}).$$

Отсюда плотность дислокаций может быть выражена следующим образом:

$$\alpha_{ij} = e_{ikl}\frac{\partial\beta_{lj}^{el.D}}{\partial x_k}. \tag{2.3}$$

Поскольку в отдельности $\beta_{ji}^{el.D}$ и $\beta_{ji}^{pl.D}$ не удовлетворяют условиям совместности, то для их обозначения используются термины несовместная упругая и несовместная пластическая дисторсия. Последнее слагаемое в (2.1) определяет совместную пластическую деформацию, не связанную с напряжениями, и описывает необратимое формоизменение тела, например за счет аннигиляции дефектов или выхода их на поверхность.

3. О значении переменных калибровочной модели. Предложенная идеализированная схема представления полной деформации (2.1), несомненно целесообразная для анализа основных механических свойств твердых тел, показывает, что упругие искажения в материале с дефектами (1.4) определяются обратимой упругой дисторсией, связанной с внешними нагрузками, и несовместной упругой дисторсией, обусловленной дефектами материала: $D_j u_i = \partial u_i^{el}/\partial x_j + \beta_{ji}^{el.D}$.

Скорость смещений, определяющая кинетическую энергию L_1, может быть представлена в виде суммы скоростей упругих смещений и смещений, обусловленных движением дефектов: $D_0 u_i = \partial u_i^{el}/\partial t + V_i$, где $V_i(x,t) = (\partial/\partial t)u_i^{el-pl.D}(x,t) + f_i(t)$; $f_i(t)$ — неизвестная функция времени. Последнее выражение, поясняющее физическое содержание потенциала V_i, не следует подставлять в формулу (1.4), поскольку оно увеличивает число переменных модели и порядок уравнений движения. Кроме того, процессы, обусловленные движением дефектов, существенно диссипативны и определяют вязкие свойства материалов, для описания которых в качестве независимой переменной выбирается скорость.

При найденных значениях потенциалов u_i^{el}, $\beta_{ji}^{el.D}$, V_i лагранжиан калибровочных полей L_2 определяется тензором плотности дислокаций (2.3) и тензором плотности потока дислокаций I_{ij}. Эта величина находится как производная по времени от пластической дисторсии, обусловленной дефектами материала [7]. Несложные преобразования с учетом равенства (2.2) позволяют выразить ее через несовместную упругую дисторсию и скорость V_i, обусловленную движением дефектов:

$$I_{ij} = -\frac{\partial\beta_{ij}^{pl.D}}{\partial t} = \frac{\partial V_j}{\partial x_i} - \frac{\partial\beta_{ij}^{el.D}}{\partial t}.$$

Из условия стационарности интеграла действия

$$\delta_\theta A = \int dt\int\limits_V \Big[\Big(\frac{\partial L}{\partial\theta} - \frac{\partial}{\partial x_i}\Big(\frac{\partial L}{\partial\theta_{,i}}\Big)\Big)\delta\theta\Big]dV + \int dt\int\limits_S \Big[\Big(\frac{\partial L}{\partial\theta_{,i}}\Big)\delta\theta\Big]dS = 0,$$

где θ принимает значения u_i^{el}, $\beta_{ji}^{el.D}$, V_i, определяются динамические уравнения модели

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho\Big(\frac{\partial u_i}{\partial t} + V_i\Big) = \frac{\partial\sigma_{ji}}{\partial x_j}, \qquad \frac{\partial}{\partial t}B\Big(\frac{\partial\beta_{ij}}{\partial t} - \frac{\partial V_j}{\partial x_i}\Big) - S\frac{\partial}{\partial x_p}\Big(\frac{\partial\beta_{ij}}{\partial x_p} - \frac{\partial\beta_{pj}}{\partial x_i}\Big) = \sigma_{ij},$$
$$\frac{\partial}{\partial x_i}B\Big(\frac{\partial\beta_{ij}}{\partial t} - \frac{\partial V_j}{\partial x_i}\Big) = \rho\Big(\frac{\partial u_j}{\partial t} + V_j\Big) \tag{3.1}$$

и условия на поверхности тела, выполняющиеся при

$$\delta u_i\big|_S = 0, \qquad \delta\beta_{ij}\big|_S = 0, \qquad \delta V_i\big|_S = 0 \tag{3.2}$$

либо при

$$\sigma_{ij}\big|_S = 0, \qquad \alpha_{ij}\big|_S = 0, \qquad I_{ij}\big|_S = 0 \tag{3.3}$$

и являющиеся следствием уравнений

$$\frac{\partial L}{\partial\theta} - \frac{\partial}{\partial x_i}\,\frac{\partial L}{\partial\theta_{,i}} = 0, \qquad \frac{\partial L}{\partial\theta_{,i}}\,\delta\theta\Big|_S = 0.$$

Верхние индексы упругих величин u_i^{el}, $\beta_{ji}^{el,D}$ в выражениях (3.1)–(3.3) и далее по тексту опущены. Нулевые вариации на границе (3.2) отвечают заданным значениям соответствующих величин и определяют граничные условия первого рода. Равенства (3.3) представляют граничные условия на свободной поверхности, где α_{ij} — тензор плотности дислокаций; I_{ij} — тензор плотности потока дислокаций; σ_{ij} — эффективные напряжения, определяемые в виде $\sigma_{ij} = (\mu/2)(u_{i,j} + \beta_{ji} + u_{j,i} + \beta_{ij}) + (\lambda/2)(u_{i,i} + \beta_{ii})\delta_{ij}$. При решении задач с заданными воздействиями на границе необходимо в выражение плотности лагранжиана (1.1) добавить соответствующие поверхностные члены.

Поскольку лагранжиан модели инвариантен относительно ковариантных производных, то из трех групп уравнений движений (3.1)–(3.3) первая является следствием двух других. Выбрав соотношение, позволяющее исключить одну переменную из двух других уравнений (калибровочное условие), можно найти решение замкнутой системы уравнений двух переменных при заданных начальных и граничных условиях, выделяющих однозначные решения. При условии $V_i = 0$, предполагающем, что поток дефектов не вызывает движений материального континуума, динамические уравнения

$$\rho\,\frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} - \frac{\partial\sigma_{ji}}{\partial x_j} = 0, \qquad B\,\frac{\partial^2\beta_{ij}}{\partial t^2} - S\,\frac{\partial}{\partial x_p}\Big(\frac{\partial\beta_{ij}}{\partial x_p} - \frac{\partial\beta_{pj}}{\partial x_i}\Big) - \sigma_{ij} = 0 \tag{3.4}$$

при соответствующих начальных и граничных условиях представляют собой динамическую модель упругого тела с внутренними напряжениями. Полученная система уравнений может быть использована для анализа упругопластического поведения материалов, предполагающего в общем случае существование трех составляющих деформации (2.1), при условии, что совместная пластическая деформация незначительна. Необходимые условия реализуются в процессах ударно-волнового нагружения, когда большая часть дефектов не успевает выйти на поверхность, обусловливая появление совместной пластической деформации.

4. Связь калибровочной теории с теориями микромеханики. Для того чтобы обосновать применимость строгого математического формализма калибровочных теорий к описанию деформации сред со структурой, рассмотрим связь калибровочных теорий с теориями микромеханики [3, 4]. В теориях микромеханики каждая точка представляет объем, который не является абсолютно жестким и претерпевает некоторую деформацию. Радиус-вектор произвольной точки в среде со структурой является суммой двух векторов $\boldsymbol{R}(r, r', t) = \boldsymbol{R}(r, t) + \boldsymbol{R}'(r, r', t)$, где $\boldsymbol{R}(r, t)$ определяет положение центра масс структурного элемента, $\boldsymbol{R}'(r, r', t)$ — положение выбранной точки относительно системы координат, связанной с центром масс структурного элемента. При описании в координатах макроуровня для вектора $\boldsymbol{R}(r, r', t)$ можно взять среднее по объему структурного элемента, что дает $\boldsymbol{R}(r, l, t) = \boldsymbol{R}(r, t) + \boldsymbol{R}'(r, l, t)$ или, переходя к вектору смещений, $\boldsymbol{u}(r, l, t) = \boldsymbol{u}(r, t) + \boldsymbol{u}'(r, l, t)$, где l — линейный размер структурного элемента. Данное выражение означает, что смещение макроточки в среде со структурой есть среднее смещение точек структурного элемента, которое определяется смещением центра масс структурного элемента и средней проекцией относительных смещений точек структурного элемента на макрокоординаты. Вектор $\boldsymbol{u}'(r,l,t)$ — своего рода отклик мезоуровня на макроуровень, который показывает, как изменится смещение макроточки в результате деформации соответствующего ей объема. В калибровочных теориях данное выражение соответствует локализации группы трансляции (1.3) и определяет дефект трансляционного типа. Предыдущие рассуждения показывают, что локализация группы трансляции обусловлена проявлением внутренней структуры макроточки и является положением, объединяющим континуальную теорию дефектов и теории упругих сред со структурой.

Геометрия деформирования в теориях микромеханики построена на основе гипотезы аффинной деформации структурного элемента $u'_i(r,r',t) = r'_k\varphi_{ki}(r,t)$, которая означает, что градиент относительных смещений (микродисторсия) однороден в структурном элементе и неоднороден в макрообъеме. Интеграл от $\varphi(r,t)$ по макроконтуру, точками которого являются структурные элементы, не равен нулю и определяет скачок смещений, который в теории дефектов ассоциируется с вектором Бюргерса, что также указывает на общую природу деформации сред со структурой и сред с дефектами.

Динамические уравнения в теориях микромеханики определяются на основе двух подходов: постулируется лагранжиан среды со структурой [3] или локальные законы сохранения [4]. В рамках данных подходов соответствующим образом задаются граничные условия. Динамические уравнения теории Миндлина, построенной на основе лагранжиана среды со структурой [3], совпадают с точностью до коэффициентов с уравнениями движения калибровочной модели (3.4). Пересечение динамических уравнений еще раз доказывает возможность описания сред со структурой в рамках калибровочной теории и позволяет связать неизвестные константы калибровочной модели B и S с инерционными свойствами структурных элементов и модулями двойных напряжений теории Миндлина [8]. Тем самым определяется связь величин, входящих в динамические уравнения теорий и граничные условия.

Заключение. В рамках калибровочного формализма (1.1)–(1.7) путем строгого обобщения классической теории упругости можно построить динамическую теорию деформации твердых тел, которая представляет собой последовательное развитие континуальной теории дефектов и вариант теории упругих сред со структурой. С позиций термодинамики обосновать применимость калибровочного подхода к описанию деформации сред со структурой можно следующим образом. Исходный лагранжиан классической теории упругости (1.1) описывает обратимые равновесные процессы деформирования в упругой области. Деформация за пределом упругости — необратимый неравновесный процесс, поэтому вариационная формулировка задачи на основе лагранжиана (1.1) становится неправомерной. Деформация за пределом упругости может быть описана на основе принципа локального равновесия, суть которого в том, что любое неравновесное состояние тела можно рассматривать как совокупность равновесных состояний малых объемов, составляющих тело. Иными словами, материал приобретает структуру, элементами которой являются малые объемы в состоянии внутреннего механического равновесия. Поскольку единственным равновесным процессом в механике деформируемого твердого тела является упругое деформирование, то малые объемы, претерпевающие упругую деформацию, могут быть смещены как целое без изменения внутреннего равновесного состояния на некоторый вектор $\boldsymbol{a}(x,t)$ (1.3), координатная зависимость которого выделяет рассматриваемый элемент объема. Таким образом, с позиций термодинамики переход от глобальных калибровочных преобразований (1.2) к локальным (1.3) предполагает существование областей локального механического равновесия, которые можно рассматривать как отдельные элементы структуры.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Эшелби Дж.** Континуальная теория дислокаций. М.: Изд-во иностр. лит., 1963.
2. **Де Витт Р.** Континуальная теория дисклинаций. М.: Мир, 1977.
3. **Миндлин Р. Д.** Микроструктура в линейной упругости // Механика. 1964. Т. 86, № 47. С. 129–160.
4. **Эринген А. К.** Теория микрополярной упругости. Т. 2. Разрушение. М.: Мир, 1975. С. 646–751.
5. **Kadic A., Edelen D. G. B.** A gauge theory of dislocations and disclinations. Berlin: Springer-Verlag, 1983.
6. **Edelen D. G. B., Lagoudas D. C.** A gauge theory and defects in solids. Amsterdam: North-Holland, 1988.
7. **Косевич А. М.** Основы механики кристаллической решетки. М.: Мир, 1972.
8. **Гриняев Ю. В., Чертова Н. В.** Связь калибровочной модели упругопластической среды с теорией Миндлина // Изв. вузов. Физика. 1994. № 4. С. 44–48.

Поступила в редакцию 16/VI 1997 г.,
в окончательном варианте — 27/I 1998 г.