УДК 539.3

МОДЕЛЬ УПРУГОПЛАСТИЧЕСКОГО ДЕФОРМИРОВАНИЯ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ КАЛИБРОВОЧНОЙ ТЕОРИИ ДЕФЕКТОВ С УЧЕТОМ ДИССИПАЦИИ ЭНЕРГИИ

С. П. Киселев

Институт теоретической и прикладной механики СО РАН, 630090 Новосибирск

На основе калибровочной теории дефектов с учетом диссипации энергии предложены математические модели пластичности и ползучести для случая малых деформаций. Предполагается, что пластичность связана с движением дислокаций, происходящим без изменения объема. В модели ползучести движение дислокаций может происходить с изменением объема, "лишний" объем уносится (приносится) точечными дефектами. С помощью обобщенно-термодинамического подхода Годунова показано, что предложенная модель пластичности является гиперболической по Фридрихсу.

Ключевые слова: калибровочная теория, упругость, пластичность, ползучесть, гиперболичность.

Введение. В настоящее время наблюдается повышенный интерес к построению математических моделей пластичности, учитывающих внутреннюю структуру материала. Можно выделить три направления исследований в этой области: геометрический подход [1], калибровочную теорию дефектов [2] и обобщенно-термодинамический подход [3, 4]. Геометрический подход предложен К. Кондо и Б. А. Билби и основан на сопоставлении упругой среды, содержащей дефекты, и неевклидова пространства с кривизной и кручением. В [1] этот подход обобщен на нестационарные процессы, получены эволюционные уравнения для тензоров кривизны, кручения и неметричности. Калибровочная теория дефектов, развитая А. Кадичем и Д. Эделеном [3], позволяет описывать упругую среду с дефектами. Отметим, что эта теория является гамильтоновой, в то время как пластическая деформация приводит к диссипации энергии. Диссипативные процессы в калибровочной теории дефектов учитывались в [5–7]. В работах С. К. Годунова с соавторами [3, 4, 8] предложен обобщенно-термодинамический подход к построению моделей неупругого поведения. Требование гиперболичности системы уравнений и наличие закона сохранения энергии позволяют получить замыкающие соотношения в виде дифференциальных уравнений для поля дефектов.

В настоящей работе исследуются модели упругопластического поведения материалов, построенные на основе калибровочной теории дефектов с учетом диссипации энергии.

1. Уравнения калибровочной теории дефектов. Лагранжиан изотропного упругого тела в случае малых деформаций $\partial u_j/\partial x_j \ll 1$ определяется формулой [9]

$$L_e = \int dV\Big[\frac{1}{2}\,\rho\dot{u}_i\dot{u}_i - \frac{\lambda}{2}\,\frac{\partial u_i}{\partial x_i}\,\frac{\partial u_j}{\partial x_j} - \frac{\mu}{2}\Big(\frac{\partial u_i}{\partial x_j}\,\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j}\,\frac{\partial u_j}{\partial x_i}\Big)\Big], \qquad (1.1)$$

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Министерства образования Российской Федерации (грант № Е02-4.0-224).

где u_i — компоненты вектора смещения; $\dot{u}_i = \partial u_i/\partial t$; λ, μ — коэффициенты Ламе; ρ — плотность. В формуле (1.1) и далее по повторяющимся индексам производится суммирование.

Лагранжиан (1.1) инвариантен при сдвиге на постоянный вектор $\boldsymbol{h} = h_i\boldsymbol{e}_i$ и повороте на постоянный вектор $\boldsymbol{\Omega} = \Omega_i\boldsymbol{e}_i$ ($\boldsymbol{e}_i$ — базисные векторы декартовой системы координат). Компоненты вектора перемещений при этих преобразованиях определяются по формулам

$$u_i' = u_i + h_i, \qquad u_i' = u_i + \varepsilon_{ijk}\Omega_j u_k, \tag{1.2}$$

где ε_{ijk} — абсолютно антисимметричный тензор Леви-Чивиты. В случае локальных (калибровочных) преобразований сдвига $h_i = h_i(x_j, t)$ и поворота $\Omega_i = \Omega_i(x_j, t)$ инвариантность лагранжиана (1.1) при преобразованиях (1.2) будет нарушаться. Для восстановления инвариантности вводят калибровочные поля, с помощью которых обычные производные $\partial_j u_i$ заменяют на ковариантные $D_j u_i$. После замены в лагранжиане $\partial_j u_i \to D_j u_i$ его инвариантность восстанавливается.

Калибровочное поле, связанное со сдвигом, определяет поле дислокаций, а связанное с поворотом, — поле дисклинаций [2]. Эксперименты показывают, что дисклинации в металлах практически никогда не возникают. Это связано с тем, что упругая энергия дисклинаций велика [10] $E_\Omega \sim \mu H^2\Omega^2$ (E_Ω — упругая энергия дисклинации на единицу ее длины; H — характерный размер тела; Ω — угол поворота (вектор Франка)), поэтому ее зарождение в идеальном кристалле энергетически невыгодно. В то же время упругая энергия, приходящаяся на единицу длины дислокации, достаточно мала $E_b \sim \mu b^2 \ln(H/\boldsymbol{b})$ ($\boldsymbol{b}$ — вектор Бюргерса, имеющий порядок межатомных расстояний a), и дислокации легко возникают и двигаются в кристаллах. Кроме дислокаций и дисклинаций имеются точечные дефекты (вакансии, включения) и поры, упругая энергия которых мала $E_a \sim \mu a^3$ (a — межатомное расстояние для вакансии и включения или размер поры). Таким образом, носителями пластической (неупругой) деформации в металлах являются либо дислокации, либо точечные дефекты и поры, а дисклинации отсутствуют. На этом основании ниже будут рассматриваться только локальные преобразования сдвига.

Следуя [2, 5–7], построим лагранжиан, инвариантный при локальных преобразованиях сдвига

$$u_i' = u_i + h_i(x_j, t), \tag{1.3}$$

путем замены частных производных в (1.1) на ковариантные

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} \longrightarrow D_4 u_i = \frac{\partial u_i}{\partial t} + \beta_{4i}, \qquad \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \longrightarrow D_j u_i = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \beta_{ji}. \tag{1.4}$$

Здесь введены калибровочные (компенсирующие) поля $\beta_{4i}(x_k, t)$, $\beta_{ji}(x_k, t)$, с которыми можно связать лагранжиан

$$L_d = \frac{1}{2}\int (BJ_{ji}J_{ji} - C\alpha_{ij}\alpha_{ij})\,dV \tag{1.5}$$

(B, C — константы). Величины

$$J_{ij} = -\Big(\frac{\partial \beta_{ij}}{\partial t} + \frac{\partial \beta_{4j}}{\partial x_i}\Big), \qquad \alpha_{ij} = \varepsilon_{ikl}\,\frac{\partial \beta_{lj}}{\partial x_k} \tag{1.6}$$

имеют смысл потока и плотности дислокаций соответственно. Такая интерпретация следует из соотношений

$$\int\limits_S \alpha_{ij}n_i\,dS = \int\limits_S \varepsilon_{ikl}\,\frac{\partial \beta_{lj}}{\partial x_k}\,n_i\,dS = \oint \beta_{lj}\,dx_l = B_j,$$

$$-\int\limits_{\partial S} J_{ij}\,dx_i = \oint \frac{\partial \beta_{ij}}{\partial t}\,dx_i = \frac{\partial B_j}{\partial t},$$

где B_j — суммарный вектор Бюргерса дислокаций, пересекающих площадку S, ограниченную контуром ∂S. Формулы преобразования калибровочных полей $\beta_{4i}(x_k,t)$, $\beta_{ji}(x_k,t)$ следуют из условия инвариантности калибровочных производных (1.4) при преобразованиях (1.3)

$$\beta'_{4i} = \beta_{4i} - \frac{\partial h_i}{\partial t}, \qquad \beta'_{ji} = \beta_{ji} - \frac{\partial h_i}{\partial x_j}. \tag{1.7}$$

Подставляя (1.7) в формулы (1.6), непосредственным вычислением можно показать, что J_{ij}, α_{ij} остаются инвариантными при преобразованиях (1.3). Отсюда следует, что лагранжиан

$$L = L_e(D_4 u_i,\, D_j u_i) + L_d(J_{ij}, \alpha_{ij}) \tag{1.8}$$

инвариантен при преобразованиях (1.3) и описывает упругую среду с дислокациями, $L_e(D_4 u_i, D_j u_i)$ получается из лагранжиана (1.1) путем замены (1.4), $L_d(J_{ij}, \alpha_{ij})$ определяется по формуле (1.5).

Уравнения Эйлера — Лагранжа [11]

$$\frac{\partial}{\partial t}\Big(\frac{\partial L}{\partial \dot q_i}\Big) + \frac{\partial}{\partial x_j}\Big(\frac{\partial L}{\partial q_{i,j}}\Big) - \Big(\frac{\partial L}{\partial q_i}\Big) = 0 \tag{1.9}$$

для переменных $q_i = \{u_i, \beta_{4i}, \beta_{ij}\}$ находятся из условия экстремальности $\delta S = 0$ действия $S = \displaystyle\int L\,dt$ и имеют вид

$$\begin{gathered} B\,\frac{\partial}{\partial x_j}\Big(\frac{\partial \beta_{ji}}{\partial t} + \frac{\partial \beta_{4i}}{\partial x_j}\Big) = \rho\Big(\frac{\partial u_i}{\partial t} + \beta_{4i}\Big), \\ B\,\frac{\partial}{\partial t}\Big(\frac{\partial \beta_{ji}}{\partial t} + \frac{\partial \beta_{4i}}{\partial x_j}\Big) = -C\varepsilon_{jkl}\,\frac{\partial \alpha_{li}}{\partial x_k} + \sigma_{ij}, \\ \rho\,\frac{\partial}{\partial t}\Big(\frac{\partial u_i}{\partial t} + \beta_{4i}\Big) = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j}. \end{gathered} \tag{1.10}$$

Для тензора напряжений σ_{ij}, входящего в (1.10), справедливы формулы

$$\begin{gathered} \sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + S_{ij}, \qquad p = -K\varepsilon^e_{kk}, \qquad S_{ij} = 2\mu e^e_{ij}, \qquad K = \lambda + 2\mu/3, \\ e^e_{ij} = \varepsilon^e_{ij} - \frac{1}{3}\,\varepsilon^e_{kk}\delta_{ij}, \qquad \varepsilon^e_{ij} = \frac{1}{2}\Big(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\Big) - \varepsilon^p_{ij}, \qquad \varepsilon^p_{ij} = \frac{1}{2}\,(\beta_{ij} + \beta_{ji}), \end{gathered} \tag{1.11}$$

где p — давление; S_{ij} — девиатор тензора напряжений; K — модуль объемного сжатия; индексом e отмечены упругие деформации. Равенство нулю поверхностных интегралов в уравнении $\delta S = 0$ позволяет определить граничные условия

$$f_i = \sigma_{ij} n_j, \qquad n_i \varepsilon_{kil} \varepsilon_{nml}\,\frac{\partial \beta_{mj}}{\partial x_n} = 0. \tag{1.12}$$

Система уравнений (1.10)–(1.12) совпадает с соответствующей линеаризованной системой уравнений, полученной в [2] для случая конечных деформаций. Можно заметить, что не все уравнения в (1.10) являются независимыми. Если продифференцировать первое уравнение в (1.10) по времени $\partial/\partial t$, а второе — по координате $\partial/\partial x_j$ и вычесть одно из другого, то получится третье уравнение (точнее, три уравнения, так как индекс i принимает значения от 1 до 3). Этот результат является следствием второй теоремы Нётер (см. [12]), согласно которой если действие S инвариантно относительно группы преобразований, зависящих от n произвольных функций, то между уравнениями Эйлера — Лагранжа существует n тождественных соотношений. В рассматриваемом случае n уравнений Эйлера — Лагранжа можно выразить через остальные уравнения. В нашем случае лагранжиан L и действие $S = \displaystyle\int L\,dt$ инвариантны относительно группы преобразований (1.3), зависящих от трех произвольных функций $h_i(x_j, t)$, поэтому в (1.10) имеется три тождественных соотношения. Таким образом, число независимых уравнений в (1.10) меньше числа независимых переменных, и поэтому к ним необходимо добавить три уравнения, которые называют условиями калибровки. Чаще всего используют калибровочные условия Лоренца или кулоновскую калибровку [13]. В настоящей работе используется кулоновская калибровка $\beta_{4i} = 0$. Тогда из первого уравнения в (1.7) следует, что $\beta'_{4i} = \beta_{4i} = 0$, если $\partial h_i/\partial t = 0$, и калибровочное преобразование имеет вид

$$u'_i = u_i + h_i(x_j),$$

где h_i не зависит от времени. С учетом сказанного выше уравнения (1.10) переходят в следующие:

$$B\,\frac{\partial^2\beta_{ji}}{\partial t^2} = -C\varepsilon_{jkl}\,\frac{\partial\alpha_{li}}{\partial x_k} + \sigma_{ij}, \qquad \rho\,\frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \frac{\partial\sigma_{ij}}{\partial x_j}, \qquad \beta_{4i} = 0.$$

Лагранжиан (1.8) остается инвариантным при преобразованиях сдвига, поэтому согласно первой теореме Нётер (см. [12, 14]) справедлив закон сохранения энергии и импульса

$$\frac{\partial T^\beta_\alpha}{\partial x^\beta} = 0, \qquad T^\beta_\alpha = \frac{\partial L}{\partial q_{i,\beta}}\,\frac{\partial q_i}{\partial x_\alpha} - L\delta^\beta_\alpha, \qquad \{\alpha,\beta\} = \{1,2,3,4\}, \tag{1.13}$$

где $T^4_4 = E$ — энергия, а T^k_4 — импульс среды:

$$\begin{gathered} E = \frac{\partial L}{\partial\dot u_i}\Big(\frac{\partial u_i}{\partial t}\Big) + \frac{\partial L}{\partial\dot\beta_{ji}}\Big(\frac{\partial\beta_{ji}}{\partial t}\Big) - L = \frac{\rho}{2}\Big(\frac{\partial u_i}{\partial t}\Big)^2 + \frac{B}{2}\Big(\frac{\partial\beta_{ij}}{\partial t}\Big)^2 + E_1\big(\varepsilon^e_{ij}\big) + E_2(\alpha_{ij}), \\ T^k_4 = \frac{\partial L}{\partial u_{i,k}}\Big(\frac{\partial u_i}{\partial t}\Big) + \frac{\partial L}{\partial\beta_{ji,k}}\Big(\frac{\partial\beta_{ji}}{\partial t}\Big) = -\sigma_{ik}\,\frac{\rho}{2}\Big(\frac{\partial u_i}{\partial t}\Big) - S_{jki}\Big(\frac{\partial\beta_{ij}}{\partial t}\Big). \end{gathered} \tag{1.14}$$

Здесь введены обозначения

$$S_{jki} = -C\varepsilon_{jkl}\alpha_{li}, \qquad E_1(\varepsilon^e_{ij}) = (\lambda/2)(\varepsilon^e_{kk})^2 + \mu\varepsilon^e_{ij}\varepsilon^e_{ij}, \qquad E_2(\alpha_{ij}) = (C/2)\alpha_{ij}\alpha_{ij} \tag{1.15}$$

(S_{jki} — тензор пары сил, создаваемых дислокациями; $E_1(\varepsilon^e_{ij})$ — упругая энергия, зависящая от упругих деформаций материала; $E_2(\alpha_{ij})$ — упругая энергия взаимодействия дислокаций). Подставляя (1.14) в (1.13), получим закон сохранения энергии упругой среды с дефектами

$$\begin{gathered} \frac{\partial E}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_k}(\sigma_{ik}v_i + S_{jki}\dot\beta_{ji}), \\ E = \frac{\rho}{2}\,v_i^2 + \frac{B}{2}\,\dot\beta^2_{ij} + E_1(\varepsilon^e_{ij}) + E_2(\alpha_{ij}), \qquad v_i = \frac{\partial u_i}{\partial t}, \qquad \dot\beta_{ij} = \frac{\partial\beta_{ij}}{\partial t}. \end{gathered} \tag{1.16}$$

Полная энергия E складывается из кинетической энергии движения среды и дефектов, а также упругой энергии среды и взаимодействующих дефектов (дислокаций). Изменение энергии E происходит за счет работы упругих напряжений σ_{ij} на перемещениях $v_i\,dt$ и момента пары сил S_{jki} на пластических дисторсиях $\dot\beta_{ji}\,dt$. Тензор S_{jki} можно разложить по индексам i,j на симметричную и антисимметричную части, поэтому вклад в работу вносят симметричная $d\varepsilon^p_{ij} = (\dot\beta_{ji} + \dot\beta_{ji})\,dt/2$ и антисимметричная $d\omega^p_{ij} = (\dot\beta_{ji} - \dot\beta_{ji})dt/2$ части тензора дисторсии.

2. Математическая модель пластичности. Описанная выше модель является частным случаем более общей калибровочной модели дефектов, содержащей дислокации и дисклинации [2]. Эти модели не учитывают диссипации энергии при пластическом течении материала. Диссипация энергии приводит к появлению в правой части уравнения Эйлера — Лагранжа диссипативной силы Рэлея [15]

$$\frac{\partial}{\partial t}\Big(\frac{\partial L}{\partial \dot q_i}\Big) + \frac{\partial}{\partial x_j}\Big(\frac{\partial L}{\partial q_{i,j}}\Big) - \Big(\frac{\partial L}{\partial q_i}\Big) = -\frac{\partial D}{\partial \dot q_i}, \qquad (2.1)$$

где $D = D(\dot q_i)$ — диссипативная функция. Обычно при пластическом деформировании металлов диссипативную функцию аппроксимируют однородной функцией первой степени от скорости пластической деформации [16]

$$D = Y_s\sqrt{(2/3)\dot\varepsilon^p_{ij}\dot\varepsilon^p_{ij}}, \qquad \dot\varepsilon^p_{ij} = \dot\beta_{(ij)} = (\dot\beta_{ji} + \dot\beta_{ji})/2,$$

где $\dot\varepsilon^p_{ij} = \partial\varepsilon^p_{ij}/\partial t$ — скорость пластической деформации; Y_s — предел текучести. В данной модели независимой переменной является β_{ij}, поэтому диссипативную функцию выберем в более общем виде

$$D = Y_s\sqrt{(2/3)\dot\beta_{ij}\dot\beta_{ij}}, \qquad (2.2)$$

где $\dot\beta_{ji} = \dot\beta_{(ij)} + \dot\beta_{[ij]}$; $\dot\beta_{[ij]} = (\dot\beta_{ij} - \dot\beta_{ji})/2$. В частном случае $\dot\beta_{[ij]} = 0$ выражение (2.2) переходит в диссипативную функцию [16].

Из эксперимента известно, что пластическая деформация происходит без изменения объема $\beta_{kk} = 0$, поэтому лагранжиан L в (2.1) нужно заменить на $\tilde L = L + \lambda_0\beta_{kk}$ (λ_0 — множитель Лагранжа). Подставляя формулу для $\tilde L$ в (2.1) и используя выражения для лагранжиана L (1.5), (1.8) и D (2.2), получим уравнения, описывающие упругопластическое деформирование [7]:

$$\begin{gathered}\rho\,\frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \frac{\partial\sigma_{ij}}{\partial x_j}, \qquad B\,\frac{\partial^2\beta_{ji}}{\partial t^2} = S'_{ji} + S_{ji} - \sqrt{\frac{2}{3}}\,Y_s\,\frac{\dot\beta_{ji}}{\sqrt{\dot\beta_{ji}\dot\beta_{ji}}},\\ S'_{ji} = \frac{\partial}{\partial x_k}\Big(S_{jki} - \frac{1}{3}\,S_{lkl}\delta_{ji}\Big),\end{gathered} \qquad (2.3)$$

где σ_{ij}, S_{ij}, S_{jki} определены в (1.11), (1.15), а граничные условия даются формулами (1.12). В частном случае, когда плотность дислокаций не зависит от пространственных координат $\partial\alpha_{ij}/\partial x_k = 0$ и скорость пластической деформации постоянна $\partial^2\beta_{ij}/\partial t^2 = 0$, из второго уравнения системы (2.3) следует $\dot\beta_{[ij]} = 0$ и соотношение Прандтля — Рейса [16] $\dot\varepsilon^p_{ij} = \sqrt{(3/2)\dot\varepsilon^p_{ij}\dot\varepsilon^p_{ij}}\ (S_{ij}/Y_s)$. Рассматривая второе уравнение системы (2.3), можно провести простую механическую аналогию. Если груз массы m на пружине с жесткостью k движется по плоскости с коэффициентом трения ν, то в одномерном случае его движение описывается уравнениями

$$\begin{gathered}m\,\frac{\partial^2 x}{\partial t^2} = -kx - \frac{\nu m g\dot x}{|\dot x|},\\ \dot x = \ddot x = 0, \qquad -kx + f^r = 0, \qquad k|x| < \nu m g.\end{gathered} \qquad (2.4)$$

Видно, что второе уравнение в (2.3) аналогично первому уравнению в (2.4), при этом сумма напряжений $S'_{ji} + S_{ji}$ играет роль упругой силы $-kx$, величина B — массы m, а $\sqrt{2/3}\, Y_s$ — силы трения скольжения νmg. Если в некоторый момент времени груз находится в состоянии покоя $\dot{x} = 0$ и упругая сила, действующая на груз, меньше силы трения скольжения ($k|x| < \nu mg$), то упругая сила уравновешивается силой трения покоя ($kx = f^r$), где $|f^r| < \nu mg$. Груз будет оставаться в покое $\dot{x} = 0$ до тех пор, пока не нарушится последнее неравенство. Для полной аналогии к системе (2.3) нужно добавить уравнения

$$\frac{\partial \beta_{ij}}{\partial t} = 0, \qquad \frac{\partial^2 \beta_{ij}}{\partial t^2} = 0, \qquad \tilde{S}_{ij} - S^r_{ij} = 0 \qquad \text{при} \quad \tilde{S}_{ij}\tilde{S}_{ij} < \frac{2}{3}\, Y_s^2, \tag{2.5}$$

где $\tilde{S}_{ij} = S_{ij} + S'_{ij}$. Напряжение S^r_{ij} аналогично силе трения покоя f^r.

Диссипация энергии при пластическом течении приводит к уменьшению энергии E, являющейся суммой упругой и кинетической энергий (см. вторую формулу в (1.16)). Чтобы получить закон сохранения энергии, нужно обобщить эту формулу, включив в нее тепловую энергию E_T:

$$E = \frac{\rho}{2}\, v_i^2 + \frac{B}{2}\, \dot{\beta}_{ij}^2 + E_1(\varepsilon^e_{ij}) + E_2(\alpha_{ij}) + E_T. \tag{2.6}$$

Нагрев среды приведет к возникновению теплового давления p_T, поэтому необходимо также изменить вторую формулу системы (1.11) следующим образом [17]:

$$p = p_x + p_T, \qquad p_x = -K\varepsilon^e_{kk}, \qquad p_T = \Gamma E_T, \qquad E_T = C_V \rho T, \tag{2.7}$$

где Γ — коэффициент Грюнайзена; C_V — удельная теплоемкость; T — температура. Уравнения (2.6), (2.7) нужно дополнить вторым законом термодинамики и соотношением Гиббса

$$T\, \frac{dS}{dt} = Y_s \sqrt{\frac{2}{3}\, \dot{\beta}_{ij}\dot{\beta}_{ij}}, \qquad \frac{dE_T}{dt} = T\, \frac{dS}{dt} - p_T\, \frac{d}{dt}\Big(\frac{1}{\rho}\Big) \tag{2.8}$$

(S — плотность энтропии). Используя (2.7), из второй формулы в (2.8) получим формулу для энтропии

$$S = S_0 + C_V \rho \ln\Big(\frac{T}{T_0}\Big(\frac{\rho_0}{\rho}\Big)^{\Gamma}\Big),$$

которая позволяет в формулах (2.6), (2.7) выразить тепловую энергию как функцию плотности и энтропии $E_T = E_T(\rho, S)$. Поскольку в данной работе рассматриваются малые деформации, то в формулах (2.8) полные производные можно заменить на частные $d/dt = \partial/\partial t + v_k\, \partial/\partial x_k \approx \partial/\partial t$. Тогда полная система уравнений записывается в виде

$$\begin{gathered} \rho\, \frac{\partial v_i}{\partial t} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j}, \qquad B\, \frac{\partial \dot{\beta}_{ij}}{\partial t} = S_{ij} + \frac{\partial}{\partial x_k}\Big(S_{ikj} - \frac{1}{3}\, S_{lkl}\delta_{ij}\Big) - \sqrt{\frac{2}{3}}\, \frac{Y_s \dot{\beta}_{ij}}{\sqrt{\dot{\beta}_{ij}\dot{\beta}_{ij}}}, \\ \frac{\partial \alpha_{lj}}{\partial t} = \varepsilon_{lki}\, \frac{\partial \dot{\beta}_{ij}}{\partial x_k}, \qquad \frac{\partial \varepsilon^e_{ij}}{\partial t} = \frac{1}{2}\Big(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i}\Big) - \frac{\partial \varepsilon^p_{ij}}{\partial t}, \qquad \frac{\partial S}{\partial t} = \frac{Y_s}{T}\, \sqrt{\frac{2}{3}\, \dot{\beta}_{ij}\dot{\beta}_{ij}}, \end{gathered} \tag{2.9}$$

где $\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + S_{ij}$; $S_{ij} = 2\mu e^e_{ij}$; $S_{ikj} = -C\varepsilon_{ikl}\alpha_{lj}$; p определяется формулами (2.7); точка над буквой обозначает частную производную по времени. Умножая первое уравнение системы (2.9) на v_i, второе — на $\dot{\beta}_{ij}$, третье — на $C\alpha_{lj}$, четвертое — на σ_{ij}, пятое — на T и складывая, получим закон сохранения энергии

$$\frac{\partial E}{\partial t} = \frac{\partial \pi^k}{\partial x_k}, \qquad E = \frac{\rho v_i^2}{2} + \frac{B\dot{\beta}_{ij}^2}{2} + E_1 + E_2 + E_T, \qquad \pi^k = \sigma_{ik} v_i + S_{ikj}\dot{\beta}_{ij}. \tag{2.10}$$

Выражение (2.10) является более общим, чем (1.16), поскольку учитывает изменение тепловой энергии среды E_T за счет необратимой диссипации энергии при пластическом деформировании.

3. Математическая модель ползучести. Ползучесть представляет собой другой пример неупругого поведения, когда под действием приложенного напряжения металл течет подобно жидкости. Как правило, процесс ползучести происходит при высоких температурах. Существует два класса моделей для описания ползучести — феноменологические и микроскопические. В первых определяющие соотношения постулируются на основе экспериментальных данных, а при построении микроскопических моделей эти соотношения выводятся из анализа движения дефектов в поле внешних и внутренних напряжений [10, 16]. В работе [18] для описания ползучести использовалась калибровочная теория дефектов. При этом предполагалось, что ползучесть связана с движением дислокаций. Однако наряду с дислокациями существенное влияние на ползучесть оказывают точечные дефекты [10]. Ниже на основе калибровочной теории дефектов предлагается математическая модель ползучести, учитывающая вклад в ползучесть дислокаций и точечных дефектов.

Рассмотрим сначала изотропную упругую среду с дислокациями, которая описывается лагранжианом (1.5), (1.8). В отличие от пластичности процесс ползучести может происходить при сколь угодно малых напряжениях и с изменением объема $\dot{\beta}_{kk} = \dot{\varepsilon}_{kk} \neq 0$, поэтому диссипативную функцию выбираем в виде

$$D = \xi(\dot{\varepsilon}^p_{kk})^2 + \eta\dot{\beta}'_{ij}\dot{\beta}'_{ij}, \tag{3.1}$$

где $\dot{\beta}'_{ij} = \dot{\beta}_{ij} - (1/3)\dot{\beta}_{kk}\delta_{ij}$. В частном случае $\xi = \eta$ выражение (3.1) совпадает с диссипативной функцией, которая использовалась в [5, 18].

Подставляя (1.5), (1.8), (3.1) в уравнение (2.1), для $q_i = \{u_i, \beta_{ij}\}$ получим уравнения

$$\begin{gathered}\rho\,\frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j}, \qquad B\,\frac{\partial^2 \beta_{ij}}{\partial t^2} = \sigma'_{ij} + \sigma_{ij} - 2\eta\dot{\beta}'_{ij} - 2\xi\,\dot{\beta}_{kk}\delta_{ij}, \\ \sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + S_{ij}, \qquad p = -K\varepsilon^e_{kk}, \qquad S_{ij} = 2\mu e^e_{ij}, \qquad \sigma'_{ij} = C\Big(\frac{\partial^2 \beta_{ij}}{\partial x_k \partial x_k} - \frac{\partial^2 \beta_{kj}}{\partial x_k \partial x_i}\Big).\end{gathered} \tag{3.2}$$

Полагая во втором уравнении системы (3.2) $\beta_{ij} = \varepsilon^p_{ij} + \omega^p_{ij}$ и разделяя шаровую и девиаторную составляющие, перепишем это уравнение в виде

$$\begin{gathered}B\,\frac{\partial^2 e^p_{ij}}{\partial t^2} = S'_{(ij)} + S_{ij} - 2\eta\dot{e}^p_{ij}, \qquad B\,\frac{\partial^2 \varepsilon^p_{kk}}{\partial t^2} = -(p' + p + 2\xi\dot{\varepsilon}^p_{kk}), \\ B\,\frac{\partial^2 \omega^p_{ij}}{\partial t^2} = S'_{[ij]} - 2\eta\dot{\omega}^p_{ij}, \qquad S'_{ij} = \sigma'_{ij} + p'\delta_{ij}, \qquad S'_{ij} = S'_{(ij)} + S'_{[ij]}, \qquad p' = -\frac{1}{3}\,\sigma'_{kk}.\end{gathered}$$

В процессах ползучести инерционные слагаемые малы по сравнению с вязкими $B\ddot{e}^p_{ij} \ll \eta\dot{e}^p_{ij}$, $B\ddot{\varepsilon}^p_{kk} \ll \xi\dot{\varepsilon}^p_{ij}$, $B\ddot{\omega}^p_{ij} \ll \eta\dot{\omega}^p_{ij}$, и уравнения ползучести принимают вид

$$\dot{e}^p_{ij} = \frac{S'_{(ij)} + S_{ij}}{2\eta}, \qquad \dot{\varepsilon}^p_{kk} = -\frac{p' + p}{2\xi}, \qquad \dot{\omega}^p_{ij} = \frac{S'_{[ij]}}{2\eta}. \tag{3.3}$$

Изменение ε^p_{kk} в (3.3) связано с неконсервативным движением дислокаций и должно сопровождаться потоком точечных дефектов (вакансий) к дислокации, которые уносят от дислокации (или приносят к ней) "лишний" ($\varepsilon^p_{kk} \neq 0$) материал.

Получим уравнения для движения точечных дефектов. Если при введении точечного дефекта объем тела изменяется на величину Ω_d, а концентрация дефектов n_d, то деформация материала будет определяться формулой

$$\dot{\varepsilon}_{kk} = \dot{\varepsilon}^e_{kk} + \dot{\varepsilon}^d_{kk}, \qquad \dot{\varepsilon}^d_{kk} = \Omega_d\dot{n}_d, \tag{3.4}$$

где ε^e_{kk} — упругая деформация решетки. Если полная деформация равна нулю ($\dot\varepsilon_{kk} = 0$), то из (3.4) получим $\dot\varepsilon^e_{kk} = -\dot\varepsilon^d_{kk}$. Для атомов внедрения $\Omega_d = \Omega_a > 0$, $\varepsilon^e_{kk} < 0$ (решетка сжата), для вакансий $\Omega_d = -\Omega_v$, $\varepsilon^e_{kk} > 0$ (решетка растянута). В первом случае действуют сжимающие напряжения $p = -K\varepsilon^e_{kk} > 0$, а во втором — растягивающие напряжения $p < 0$. Обычно точечные дефекты моделируют центрами дилатансии [10]. В этом случае дефекту в точке x^0_i соответствует плотность сил $f_i = -K\Omega_d\delta(x_i - x^0_i)$. Если такой дефект находится в поле упругих сил $p = -K\varepsilon^e_{kk}$, то ему соответствует упругая энергия взаимодействия $E' = -K\Omega_d\varepsilon^e_{kk}$.

Поскольку концентрация дефектов n_d обычно велика, то дефекты можно описывать как твердый раствор в решетке атомов. Введя концентрацию раствора $c = n_d/N \ll 1$ (N — количество атомов в решетке в единице объема), запишем химический потенциал дефекта μ, так же как и в теории слабых растворов [10]:

$$\mu = T\ln c + \Omega_d p + \psi(T). \tag{3.5}$$

Из условия равновесия точечных дефектов $\mu = \mathrm{const}$ следует формула для равновесной концентрации

$$c = c_0(T)\exp(-p\Omega_d/T).$$

Если $\nabla\mu \neq 0$, то возникает поток точечных дефектов $\boldsymbol{j} = -T^{-1}n_d D\nabla\mu$, для которого с учетом (3.5) получим

$$\boldsymbol{j} = -D\nabla n_d - T^{-1}n_d\Omega_d D\nabla p. \tag{3.6}$$

Используя уравнение неразрывности, запишем уравнение для концентрации дефектов

$$\frac{\partial n_d}{\partial t} + \operatorname{div}\boldsymbol{j} = \dot\theta, \tag{3.7}$$

где $\boldsymbol{j}$ определяется уравнением (3.6). Источниковый член $\dot\theta$ связан с осаждением или испарением атомов на линии дислокации $\dot\theta = \dot\varepsilon^p_{kk}/\Omega_d$, где $\dot\varepsilon^p_{kk}$ определяется второй формулой в (3.3). В частном случае $\boldsymbol{j} = 0$ из (3.4), (3.7) следует $\dot\varepsilon^d_{kk} = \dot\varepsilon^p_{kk}$. В качестве граничных условий для уравнения (3.7) нужно задать $n_d\big|_\gamma$ либо $\nabla n_d\big|_\gamma$ на границе γ. Выход дефектов на поверхность сопровождается ее перемещением по нормали со скоростью

$$v_n\big|_\gamma = \Omega_d j\big|_\gamma. \tag{3.8}$$

4. Симметризация уравнений упругопластического деформирования (2.9). Наличие закона сохранения энергии (2.10) для системы уравнений (2.9) позволяет использовать обобщенно-термодинамический подход, развитый в [8, 19], для приведения ее к виду с симметричными матрицами. Внутренняя энергия E (2.6), входящая в закон сохранения энергии (2.10), является выпуклой функцией собственных переменных $E = E(\rho v_i, B\dot\beta_{ij}, \varepsilon^e_{ij}, C\alpha_{ij}, S)$. Используя преобразование Лежандра

$$F^0 = w_i(\rho v_i) + b_{ij}(B\dot\beta_{ij}) + r_{ij}\varepsilon^e_{ij} + a_{ij}(C\alpha_{ij}) + TS - E, \tag{4.1}$$

введем потенциал F^0, зависящий от сопряженных переменных

$$F^0 = F^0(w_i, b_{ij}, r_{ij}, a_{ij}, T), \tag{4.2}$$

которые определяются по формулам

$$w_i = \frac{\partial E}{\partial(\rho v_i)}, \qquad b_{ij} = \frac{\partial E}{\partial(B\dot\beta_{ij})}, \qquad r_{ij} = \frac{\partial E}{\partial\varepsilon^e_{ij}}, \qquad a_{ij} = \frac{\partial E}{\partial(C\alpha_{ij})}, \qquad T = \frac{\partial E}{\partial S}. \tag{4.3}$$

Из (4.1)–(4.3) следует

$$dF^0 = \rho v_i\, dw_i + B\dot{\beta}_{ij}\, db_{ij} + \varepsilon^e_{ij}\, dr_{ij} + C\alpha_{ij}\, da_{ij} + S\, dT,$$

откуда находим

$$\rho v_i = F^0_{w_i}, \qquad B\dot{\beta}_{ij} = F^0_{b_{ij}}, \qquad \varepsilon^e_{ij} = F^0_{r_{ij}}, \qquad C\alpha_{ij} = F^0_{a_{ij}}, \qquad S = F^0_T, \tag{4.4}$$

где нижний индекс у F^0 обозначает частную производную, например $F^0_{w_i} = \partial F^0/\partial w_i$ и т. д. Аналогично рассмотрим три преобразования Лежандра, построенных по трем функциям (2.10) $\pi^k = \sigma_{ik} v_i + S_{ikj}\dot{\beta}_{ij}$, и определим три потенциала

$$\begin{gathered} F^k(w_i, b_{ij}, r_{ij}, a_{ij}) = w_i\sigma_{ik} + r_{ij}H_{ikj} + b_{ij}S_{ikj} + a_{ij}G_{ikj} - \pi^k, \\ w_i = \frac{\partial \pi^k}{\partial \sigma_{ik}}, \qquad r_{ij} = \frac{\partial \pi^k}{\partial H_{ikj}}, \qquad b_{ij} = \frac{\partial \pi^k}{\partial S_{ikj}}, \qquad a_{ij} = \frac{\partial \pi^k}{\partial G_{ikj}} \end{gathered} \tag{4.5}$$

(суммирование по k не производится). Используя явный вид функций π^k (2.10), зависящих от переменных

$$\pi^k = \pi^k(\sigma_{ik}, H_{ikj}, S_{ikj}, G_{ikj}) \qquad (H_{ikj} = (\delta_{ik}v_j + \delta_{jk}v_i)/2, \quad G_{ikj} = C\varepsilon_{ikl}\dot{\beta}_{lj}), \tag{4.6}$$

можно показать, что новые переменные в (4.5) совпадают с переменными, введенными ранее по формулам (4.3). Величины S_{ikj} определены в (1.15), а переменная H_{ikj} введена в работе [8]. Используя (4.5), (4.6), получим

$$dF^k = \sigma_{ik}\, dw_i + S_{ikj}\, db_{ij} + H_{ikj}\, dr_{ij} + G_{ikj}\, da_{ij},$$

откуда следуют формулы

$$\sigma_{ik} = F^k_{w_i}, \qquad S_{ikj} = F^k_{b_{ij}}, \qquad H_{ikj} = F^k_{r_{ij}}, \qquad G_{ikj} = F^k_{a_{ij}}, \tag{4.7}$$

в которых введены обозначения

$$F^k_{w_i} = \frac{\partial F^k}{\partial w_i}, \qquad F^k_{b_{ij}} = \frac{\partial F^k}{\partial b_{ij}}, \qquad F^k_{r_{ij}} = \frac{\partial F^k}{\partial r_{ij}}, \qquad F^k_{a_{ij}} = \frac{\partial F^k}{\partial a_{ij}}.$$

Подставляя формулы (4.4), (4.7) в уравнения упругопластического деформирования (2.9), перепишем их в новых переменных w_i, b_{ij}, r_{ij}, a_{ij}, T:

$$\begin{gathered} \frac{\partial F^0_{w_i}}{\partial t} = \frac{\partial F^k_{w_i}}{\partial x_k}, \qquad \frac{\partial F^0_{b_{ij}}}{\partial t} = \frac{\partial F^k_{b_{ij}}}{\partial x_k} - \frac{1}{3}\frac{\partial F^k_{b_{ll}}}{\partial x_k}\delta_{ij} + r_{ij} - \frac{1}{3} r_{ll}\delta_{ij} - \sqrt{\frac{2}{3}}\, Y_s \frac{b_{ij}}{\sqrt{b_{ij}b_{ij}}}, \\ \frac{\partial F^0_{a_{ij}}}{\partial t} = \frac{\partial F^k_{a_{ij}}}{\partial x_k}, \qquad \frac{\partial F^0_{r_{ij}}}{\partial t} = \frac{\partial F^k_{r_{ij}}}{\partial x_k} - \frac{1}{2}(b_{ij} + b_{ji}), \qquad \frac{\partial F^0_T}{\partial t} = Y_s\sqrt{\frac{2}{3}\, b_{ij}b_{ij}}\,. \end{gathered} \tag{4.8}$$

Введя вектор

$$q_i = (b_{11}, \ldots, b_{33}, a_{11}, \ldots, a_{33}, r_{11}, \ldots, r_{33}, w_1, w_2, w_3, T),$$

уравнения (4.8) можно записать в виде

$$\frac{\partial F^0_{q_i}}{\partial t} = \frac{\partial F^k_{q_i}}{\partial x_k} + \ldots,$$

где точки стоят вместо членов, не содержащих производных, и выражения $-(1/3)(\partial F^k_{b_{ll}}/\partial x_k)\delta_{ij}$, которое будет проанализировано ниже. Следуя [8], перепишем эти уравнения следующим образом:

$$F^0_{q_iq_j}\frac{\partial q_j}{\partial t} = F^k_{q_iq_j}\frac{\partial q_j}{\partial x_k} + \ldots\,. \tag{4.9}$$

Матрица $F^k_{q_i q_j}$ симметрическая, а $F^0_{q_i q_j}$ положительно-определенная. Последнее следует из того факта, что преобразование Лежандра (4.1) не меняет выпуклость функции. Поэтому если $E = E(y_i)$ — выпуклая функция собственных переменных y_i, то $F^0 = F^0(q_i)$ — также выпуклая функция q_i. Симметрический вид системы уравнений (4.8) нарушает слагаемое $-(1/3)(\partial F^k_{b_{ll}}/\partial x_k)\delta_{ij}$ во втором уравнении этой системы. Однако симметрический вид можно восстановить, если в правую часть третьего уравнения добавить нулевое слагаемое

$$T^k_{ij} = -\frac{1}{3}\,F^k_{b_{ll}a_{ij}}\,\frac{\partial b_{mn}}{\partial x_k}\,\delta_{mn}.$$

Для доказательства тождества $T^k_{ij} = 0$ выразим с помощью (2.6), (4.3) новые переменные через старые

$$w_i = v_i, \qquad b_{ij} = \dot\beta_{ij}, \qquad r_{ij} = \sigma_{ij}, \qquad a_{ij} = \alpha_{ij}. \tag{4.10}$$

Из (4.10) и равенств $\beta_{nn} = \dot\beta_{nn} = b_{nn} = b_{mn}\delta_{mn} = 0$ получим искомое тождество

$$\frac{\partial b_{mn}}{\partial x_k}\,\delta_{mn} = -\frac{1}{3}\,F^k_{b_{ll}a_{ij}}\,\frac{\partial b_{mn}}{\partial x_k}\,\delta_{mn} = T^k_{ij} = 0, \tag{4.11}$$

где

$$\frac{1}{3}\,F^k_{b_{ll}a_{ij}} = \frac{1}{3}\,\frac{\partial}{\partial a_{ij}}\,S_{lkl} = \frac{C}{3}\,\varepsilon_{ijk}. \tag{4.12}$$

Аналогично из (4.7), (4.10), (4.12) получим

$$-\frac{1}{3}\,\frac{\partial F^k_{b_{ll}}}{\partial x_k}\,\delta_{ij} = -\frac{1}{3}\,\frac{\partial S_{lkl}}{\partial x_k}\,\delta_{ij} = -\frac{C}{3}\,\varepsilon_{nmk}\,\frac{\partial a_{mn}}{\partial x_k}\,\delta_{ij}. \tag{4.13}$$

С учетом равенств (4.11)–(4.13) перепишем систему (4.8) в симметрическом виде:

$$\frac{\partial F^0_{w_i}}{\partial t} = \frac{\partial F^k_{w_i}}{\partial x_k}, \qquad \frac{\partial F^0_{b_{ij}}}{\partial t} = \frac{\partial F^k_{b_{ij}}}{\partial x_k} - \frac{1}{3}\,F^k_{b_{ll}a_{mn}}\,\frac{\partial a_{mn}}{\partial x_k}\,\delta_{ij} + r_{ij} - \frac{1}{3}\,r_{ll}\delta_{ij} - \sqrt{\frac{2}{3}}\,Y_s\,\frac{b_{ij}}{\sqrt{b_{ij}b_{ij}}},$$

$$\frac{\partial F^0_{a_{ij}}}{\partial t} = \frac{\partial F^k_{a_{ij}}}{\partial x_k} - \frac{1}{3}\,F^k_{b_{ll}a_{ij}}\,\frac{\partial b_{mn}}{\partial x_k}\,\delta_{mn}, \qquad \frac{\partial F^0_{r_{ij}}}{\partial t} = \frac{\partial F^k_{r_{ij}}}{\partial x_k} - \frac{1}{2}\,(b_{ij} + b_{ji}), \tag{4.14}$$

$$\frac{\partial F^0_T}{\partial t} = Y_s\sqrt{\frac{2}{3}\,b_{ij}b_{ij}},$$

где $F^k_{b_{ll}a_{ij}} = (1/3)C\varepsilon_{ijk}$. Поскольку система уравнений (4.14) симметрическая, а функция $F^0(q_i)$ выпуклая, то она является гиперболической по Фридрихсу (см. [8]).

ЛИТЕРАТУРА

1. **Мясников В. П., Гузев М. А.** Геометрическая модель дефектной структуры упругопластической сплошной среды // ПМТФ. 1999. Т. 40, № 2. С. 163–173.
2. **Кадич А., Эделен Д.** Калибровочная теория дислокаций и дисклинаций. М.: Мир, 1987.
3. **Godunov S. K.** The equations of the elasticity with the dissipation as the nontrivial example of thermodynamically compatibles hyperbolic equations // Symp. at the nonlinear hyperbolic equations, Cambridge, Mar. 2003. (В печати).
4. **Годунов С. К., Гордиенко В. М.** Усложненные структуры галилеево-инвариантных законов сохранения // ПМТФ. 2002. Т. 43, № 2. С. 3–21.

5. **Попов В. Л., Слядников Е. Е., Чертова Н. В.** Динамическая калибровочная теория волн в упругопластических средах // Физическая мезомеханика и компьютерное конструирование материалов. Новосибирск: Наука. Сиб. отд-ние, 1995. Т. 1. С. 113–129.
6. **Гриняев Ю. В., Панин В. Е.** Полевая теория дефектов на мезоуровне // Докл. РАН. 1997. Т. 353, № 1. С. 37–39.
7. **Киселев С. П., Белай О. В.** Континуальная калибровочная теория дефектов при наличии диссипации энергии // Физ. мезомеханика. 1999. Т. 2, № 5. С. 69–72.
8. **Годунов С. К., Роменский Е. И.** Элементы механики сплошных сред и законы сохранения. Новосибирск: Науч. кн., 1998.
9. **Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.** Теория упругости. М.: Наука, 1987.
10. **Косевич А. М.** Физическая механика реальных кристаллов. Киев: Наук. думка, 1981.
11. **Бердичевский В. Л.** Вариационные принципы механики сплошной среды. М.: Наука, 1983.
12. **Гельфанд И. М., Фомин С. В.** Вариационное исчисление. М.: Физматгиз, 1961.
13. **Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.** Теория поля. М.: Наука, 1988.
14. **Овсянников Л. В.** Групповой анализ дифференциальных уравнений. М.: Наука, 1978.
15. **Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.** Механика. М.: Наука, 1965.
16. **Работнов Ю. Н.** Механика деформирования твердого тела. М.: Наука, 1988.
17. **Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П.** Физика ударных волн и газодинамических явлений. М.: Наука, 1966.
18. **Гриняев Ю. В., Чертова Н. В.** Описание ползучести в рамках полевой теории дефектов // ПМТФ. 2000. Т. 41, № 3. С. 177–183.
19. **Годунов С. К.** Элементы механики сплошных сред. М.: Наука, 1978.

Поступила в редакцию 29/IX 2003 г.