УДК 539.4

Динамическая прочность материалов с точки зрения неравновесной термодинамики*

Т. А. Хантулева

Санкт-Петербургский госуниверситет, Санкт-Петербург, Россия

Экспериментальные исследования по ударному нагружению материалов показали, что в процессе релаксации напряжений еще до начала диссипации возникает энергообмен между макро- и мезоскопическим масштабными уровнями. Задача распространения нестационарной волны в релаксирующей среде с учетом мезоскопических характеристик, как дисперсия массовой скорости, и параметров, определяющих масштабы и типы мезоструктур, сформулирована на основе самосогласованного нелокально-гидродинамического подхода. Обнаружено, что динамические свойства материалов определяются термодинамикой макро-мезоэнергообмена. В частности, эксперимент подтвердил, что максимальная откольная прочность имеет место в условиях динамического равновесия, которое характеризуется минимальной скоростью повышения энтропии.

Ключевые слова: ударное нагружение материала, релаксация напряжений, энергообмен, откольная прочность.

Введение. В серии экспериментальных исследований по ударному нагружению материалов [1–3] обнаружено, что процесс релаксации напряжений сопровождается образованием новых внутренних структур на мезоскопическом масштабном уровне. Именно эти мезоскопические структуры определяют динамические свойства материалов. В настоящее время стало совершенно очевидно, что причина возникновения мезоструктур – коллективные эффекты, появляющиеся как следствие существенно неравновесных процессов переноса импульса и энергии при высокоскоростном нагружении среды. Одна из наиболее важных особенностей процессов высокоскоростного деформирования в отличие от квазистатического – возникновение пространственно-временных корреляций между элементарными носителями деформации. Следовательно, процесс релаксации в ударно-сжатом материале не может быть корректно описан в рамках традиционной теории упругости и пластичности. Теория, способная описать одновременно как перестройку внутренней структуры среды, так и изменение кинематического механизма деформирования, должна быть нелокальной, чтобы учесть коллективные эффекты взаимодействия элементов среды, и самосогласованной, чтобы ввести в систему обратную связь.

Самосогласованная нелокальная теория неравновесных процессов переноса. Согласно современной неравновесной статистической механике, уравнения баланса для макроскопических величин в условиях существенной неравновесности полностью не локализуются. Обобщенные нелокальные гидродинамические уравнения с памятью были выведены из принципов [4, 5]. Они включают в себя нелокальные в пространстве и запаздывающие по

---

* Доклад на IV Международном симпозиуме “Прочность и разрушение материалов и элементов конструкций при импульсном нагружении” (IMPULSE-2001).

времени определяющие соотношения между гидродинамическими градиентами и диссипативными потоками. Новый подход, развитый в работах [6, 7], заключается в построении нелокальных релаксационных моделей с параметрами, связанными с характеристиками внутренней структуры среды. Для определения этих параметров из граничных условий выведены нелинейные функциональные соотношения, которые определяют спектр значений масштабов внутренней структуры, изменяющийся во времени. В неравновесных условиях, когда существенны эффекты нелокальности, вышеуказанный спектр дискретный, а вблизи локального равновесия, когда нелокальностью можно пренебречь, он непрерывный. Функциональные соотношения привносят в систему обратную связь, делают формулировку замкнутой и самосогласованной.

Нелокальная модель среды с мезоскопическими структурами. Известная модель среды – модель Максвелла – определяет девиатор тензора напряжений. В одномерном случае деформации компонента S в направлении оси x находится следующим образом:

$$\frac{\partial S}{\partial t}=\frac{4}{3}G\frac{\partial u}{\partial x}-\frac{S-S^*}{t_r(S)}, \tag{1}$$

где u – массовая скорость в направлении оси x; $\frac{\partial u}{\partial x}=-\frac{1}{\rho}\frac{\partial \rho}{\partial t}$; ρ – массовая плотность; G – модуль упругого сдвига; $t_r(S)$ – время релаксации. Предполагается, что среда имеет хорошо определенный порог, обозначенный критическим напряжением сдвига S^*. Здесь вместо деформации в уравнение (1) в качестве переменной введена скорость u, которая может быть измерена в экспериментах по ударному сжатию материалов.

Интегрируя уравнение (1) при начальном условии $S(0)=0$, получаем выражение

$$S=S^*\left[1-\exp\left\{-\int_0^t\frac{dt'}{t_r}\right\}\right]+\frac{4}{3}Gt_r\int_0^t\frac{dt'}{t_r}\exp\left\{-\int_{t'}^t\frac{dt''}{t_r}\right\}\frac{\partial u}{\partial x}(x,t''). \tag{2}$$

В предельном случае, когда процесс релаксации завершен, выражение (2) описывает модель ньютоновской вязкой жидкости, в случае замороженной релаксации имеет место модель идеально упругого тела:

а) $S\to S^*+\frac{2}{3}\eta\frac{\partial u}{\partial r}$; $\eta=2Gt_r$; $t_r\to 0$;

б) $S\to\frac{4}{3}Ge$; $t_r\to\infty$.

Здесь $\eta=2Gt_r$ – эффективная сдвиговая вязкость среды; $e=\int_0^t dt\frac{\partial u}{\partial x}$, где e – полная деформация в направлении оси x.

Из нелокально гидродинамического подхода следует [4–6] обобщение релаксационной модели [4] на случай нелинейных нестационарных процессов:

$$S = S^*(1+\alpha)k_0(x,t;\varepsilon,\gamma) +$$

$$+\frac{2}{3}\eta(1+\alpha)\int_0^\infty \frac{dx'}{\varepsilon}\exp\left\{-\frac{\pi}{\varepsilon^2}(x'-x-\gamma)^2\right\}\frac{\partial u}{\partial x'}(x',t). \qquad (3)$$

Момент интегрального ядра нулевого порядка имеет вид

$$k_0(x,t;\varepsilon,\gamma) = \int_0^\infty \frac{dx'}{\varepsilon}\exp\left\{-\frac{\pi}{\varepsilon^2}(x'-x-\gamma)^2\right\}\Bigg|\begin{matrix}\xrightarrow[\varepsilon\to 0]{} 1\\ \xrightarrow[\varepsilon\to\infty]{} 0\end{matrix}.$$

Модель (3) учитывает нелокальные свойства среды (коллективные эффекты) в условиях, далеких от термодинамического равновесия. Модельное ядро должно удовлетворять тем же асимптотическим условиям, что и ядро в модели (2). В промежуточном случае нелокальная модель описывает процесс релаксации среды с внутренней структурой мезоскопического масштабного уровня. Таким образом, новая нелокальная модель обобщает модель Максвелла для упругой, вязкой и пластической среды на случай структурной релаксации на промежуточном мезоскопическом масштабном уровне, который характеризуется конечной длительностью релаксации. Пренебрегая эффектами структурной релаксации, т.е. нелокальными эффектами в модели (3), и, заменяя интегральное ядро простой экспонентой, получаем модель Максвелла для упругой, вязкой и пластической среды (1).

Нелокальная модель (3) включает в себя три внутренних параметра: $\varepsilon, \alpha, \gamma$, которые имеют следующий физический смысл:

ε – характерный радиус нелокальных корреляций, порядок которых совпадает с характерной длиной релаксации и характерным масштабом внутренней структуры;

$(1+\alpha)$ – относительная эффективная сдвиговая вязкость среды, учитывающая эффекты внутренней структуры среды, $\alpha \xrightarrow[\varepsilon\to 0]{} 0$;

γ – параметр поляризации среды вдоль направления наибольших градиентов (особенно вблизи границы $\gamma \xrightarrow[\varepsilon\to 0]{} 0$). Существует тесная связь между параметром γ и возникновением ротационных движений элементов внутренней структуры среды, поскольку γ обеспечивает асимметричность тензора сдвиговых напряжений.

Все модельные параметры являются функциями времени, поскольку характеристики внутренней структуры должны изменяться в процессе структурной релаксации.

Согласно самосогласованному нелокальному подходу [6–9], внутренние модельные параметры представляют собой неизвестные функционалы макроскопических градиентов. Три функциональных соотношения для определения трех параметров должны быть выведены из неравновесных граничных условий:

$$\Phi_i\left[u(x,t), \frac{\partial u}{\partial x}(x,t);\ x_\text{г};\ \varepsilon(t), \gamma(t), \alpha(t)\right], \quad i=1, 2, 3. \tag{4}$$

Тогда функциональные соотношения (4), которые можно рассматривать как дисперсионные соотношения, вместе с модельным определяющим уравнением (3) определяют спектр параметров внутренней структуры как функции времени $\varepsilon(t), \gamma(t), \alpha(t)$. В предельных ситуациях часть параметров стремится к постоянным значениям, соответствующим таким характеристикам среды, как модуль сдвига и сдвиговая вязкость:

$$\frac{\eta(1+\alpha)}{\varepsilon}(t) \underset{t_r\to\infty}{\to} \frac{2G}{C}; \qquad \eta(1+\alpha)(t) \underset{t_r\to 0}{\to} \eta.$$

Таким образом, динамическое поведение среды определяется не только свойствами самой среды, но и историей динамического деформирования во всем объеме, занимаемом средой, включая границы.

Самосогласованная нелокальная формулировка задачи о распространении плоской волны. Рассматривается задача о распространении плоской волны в полупространстве, заполненном средой. Уравнения баланса массы и импульса для волны, распространяющейся вдоль оси x, записываются в лагранжевых координатах:

$$\frac{\rho_0}{\rho^2}\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} = 0; \tag{5}$$

$$\rho_0\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(S-P) = 0, \tag{6}$$

где лагранжева координата $x = \rho_0 \int_0^x \rho(x',t)dx'$. Девиатор S и сферическая часть P тензора напряжений представляются в виде суммы двух слагаемых каждый: $S = S^e + S^m$; $P = P^e + P^m$. Первые слагаемые S^e, P^e характеризуют упругие свойства среды: $S^e = \frac{4}{3}G\frac{\rho-\rho_0}{\rho}$; $P^e = (\rho-\rho_0)C^2$, вторые слагаемые S^m, P^m – влияние мезоскопических эффектов на поле напряжений. Уравнения баланса массы и импульса (5), (6) могут быть сведены к одному волновому уравнению с источником:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - a_l^2\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = -\frac{\partial^2}{\partial t\partial x}(S^m - P^m)\rho_0^{-1}, \tag{7}$$

где $a = C\rho/\rho_0$ – лагранжева скорость распространения звуковой волны; величина $a_l^2 = a^2 + (4/3)G\rho_0^{-1}$ обозначает квадрат продольной скорости распространения звука.

С помощью функции Грина для волнового оператора уравнение (7) для волны, распространяющейся в положительном направлении оси x, можно переписать в интегральной форме (формула Даламбера):

$$u(x,t) = u_0(x - a_l t) + \frac{1}{a_l \rho_0} \int_0^t d\tau \int_{x - a_l(t-\tau)}^{x} d\xi \left[-\frac{\partial^2}{\partial\tau\partial\xi}(S^m - P^m) \right]. \qquad (8)$$

При этом выполняются следующие начальные и граничные условия: $u(x,0) = \frac{\partial u}{\partial t}(x,0) = 0;\ u(0,t) = U_0\Omega(t).$

Решение нулевого приближения имеет форму простой волны $u_0(x - a_l t) = U_0\Omega(x - a_l t)$, которая распространяется без изменения своей формы, тогда как мезоскопические эффекты определяют изменение формы и скорости фронта. В системе координат, связанной с фронтом, изменение формы профиля скорости нестационарной волны вследствие наличия эффектов релаксации мезоскопических структур, может быть определено явно:

$$\Delta u(x,t) = \frac{1}{a_l \rho_0} \int_0^t d\tau \int_{x - a_l(t-\tau)}^{x} d\xi \left[\frac{\partial^2}{\partial\tau\partial\xi}(S^m - P^m) \right] = -\frac{1}{a_l \rho_0} \Delta(S^m - P^m). \qquad (9)$$

Таким образом, форма пластического фронта определяется мезоскопическими процессами, тогда как во всех предельных случаях последние не возникают.

Многомасштабный и многостадийный энергообмен при высокоскоростном деформировании материалов. В работах [1–3] было экспериментально обнаружено, что ударное нагружение металлов в диапазоне скоростей удара 500...1000 м/с сопровождается образованием мезоскопических структур. В условиях высокоскоростного деформирования внутри фронта волны кинетическая энергия движения среды, полученная при ударе, переходит в энергию флуктуаций плотности и скорости, которые возбуждаются на мезоскопическом масштабном уровне. Величина, характеризующая интенсивность энергообмена между макроскопическим и мезоскопическим масштабными уровнями – дисперсия массовой скорости $D(x,t)$, может быть измерена непосредственно в эксперименте. Сначала дисперсия скорости растет, затем уменьшается, но не всегда достигает на плато импульса своего исходного значения. Если мезоскопические флуктуации скорости успевают затухать внутри переднего фронта волны, то энергообмен между макроскопическим и мезоскопическим масштабными уровнями можно считать обратимым. Тогда дисперсия массовой скорости играет роль температуры мезоскопических флуктуаций и, следовательно, она включена в уравнения состояния среды в условиях высокоскоростного деформирования.

Таким образом, уравнения состояния для мезоскопических характеристик должны описывать термодинамические свойства среды с возбужденными флуктуациями. Сферическая часть тензора напряжений, связанная с мезоскопическими эффектами P^m, может быть названа мезоскопическим, или флуктуационным давлением и определена аналогично давлению тепловых флуктуаций:

$$P^m = \rho_0 D. \tag{10}$$

Напомним, что девиатор напряжений $S^m = S - S^e = \rho_0 R$, связанный с релаксацией мезоскопического масштабного уровня, определяется нелокальной моделью среды (3). Дисперсия скорости D будет найдена из уравнения баланса внутренней энергии ниже.

В общем случае используется обычное уравнение баланса внутренней энергии:

$$\rho_0 \frac{\partial E}{\partial t} + (S - P)\frac{\partial u}{\partial x} = 0. \tag{11}$$

Аналогично тензору напряжений внутренняя энергия E может быть представлена в виде суммы $E = E^e + E^m$ (E^e – холодная упругая энергия; E^m – энергия мезоскопических степеней свободы).

Тогда уравнение (11) расщепляется на две части в соответствии с масштабами и стадиями релаксации:

$$\rho_0 \frac{\partial E^e}{\partial t} + (S^e - P^e)\frac{\partial u}{\partial x} + \rho_0 \frac{\partial E^m}{\partial t} + (S^m - P^m)\frac{\partial u}{\partial x} = 0. \tag{12}$$

Упругая компонента внутренней энергии определяется потенциалом кристаллической решетки, а для мезоскопической компоненты по аналогии можно записать следующее уравнение состояния:

$$E^m = c_m D + E^{ms}, \tag{13}$$

где c_m – энергоемкость мезоскопических флуктуаций, $c_m = (\partial E/\partial D)$. В свою очередь, полная энергия на мезоскопическом масштабном уровне E^m состоит из двух частей: кинетической энергии мезофлуктуаций $c_m D$ и потенциальной энергии E^{ms}, запасенной в мезоскопических структурах.

На начальной стадии релаксации $t << t_r$, когда мезоскопические флуктуации еще не успевают возбудиться ($c_m \to \infty$), мезоскопический масштабный уровень считается замороженным. Тогда уравнение (13) дает $D = D(t = 0)$. Если же мезоскопический уровень успел срелаксировать ($c_m \to 0$), то флуктуации скорости переходят на микроуровень и становятся тепловыми, а уравнение (12) описывает последнюю стадию релаксации, протекающую на больших временах, $t >> t_r$ (это необратимая диссипативная стадия релаксации, когда ударное сжатие и высокоскоростное формоизменение приводят к нагреванию среды.) На промежуточной стадии, когда свойства материала характеризуются конечными значениями энергоемкости мезоскопических степеней свободы c_m, макро-мезоэнергообмен может быть как обратимым, так и необратимым в зависимости от того, остается ли постоянной потенциальная энергия мезоуровня $\partial E^{ms}/\partial t = 0$. Это значит, что необратимый энергообмен соответствует возникновению структурного перехода в среде при высокоскоростном деформировании. Подставляя выражение (13) в уравнение баланса (12), получаем

$$\rho_0 \frac{\partial (c_m D + E^{ms})}{\partial t} + \rho_0 (R - D) \frac{\partial u}{\partial x} = 0. \qquad (14)$$

В случае если энергообмен обратим и мезоструктуры не изменяются $\partial E^{ms}/\partial t = 0$, уравнение (14) описывает динамику мезофлуктуаций и определяет дисперсию скорости $D(x,t)$.

Термодинамика макро-мезоэнергообмена. Повышение энтропии на мезоскопическом масштабном уровне, обусловленное необратимым переносом энергии, записывается следующим образом:

$$\sigma^m = J^m X^m = \frac{\partial E^{ms}}{\partial t} (S^m - P^m) \frac{\partial u}{\partial x}. \qquad (15)$$

Энергия высокоскоростного формоизменения $(S^m - P^m)\dfrac{\partial u}{\partial x} = X^m$ имеет смысл обобщенной термодинамической силы, которая вызывает необратимый перенос энергии – термодинамический поток $\partial E^{ms}/\partial t = J^m$, связанный со структурным переходом. Если $\partial E^{ms}/\partial t > 0$, то часть энергии мезофлуктуаций расходуется на образование новых структур с возбуждением новых степеней свободы и масштабных уровней. При этом $\sigma^m < 0$. Если же $\partial E^{ms}/\partial t < 0$, то энергия мезофлуктуаций возрастает за счет поступления энергии с микроскопического уровня при высокоскоростном деформировании кристаллической решетки и возникновении резонансных эффектов. Теоретическая возможность изменения потенциальной энергии кристаллической решетки при ударном нагружении была спрогнозирована в работе [10]. В этом случае $\sigma^m > 0$, исходные структуры разрушаются, новые, более простые характеризуются меньшим числом степеней свободы и масштабов. Это – начало разрушения материала. При динамическом равновесии ($\sigma^m = 0$) изменения внутренних структур не происходит, а процесс макро-мезоэнергообмена обратим.

Скорость повышения энтропии в динамическом равновесии имеет минимум:

$$\frac{d\sigma^m}{dt} = \frac{\partial^2 E^{ms}}{\partial t^2}(S^m - P^m)\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial E^{ms}}{\partial t}\frac{\partial}{\partial t}\left((S^m - P^m)\frac{\partial u}{\partial x}\right);$$
$$\frac{\partial}{\partial X^m}\frac{d\sigma^m}{dt} = \frac{\partial^2 E^{ms}}{\partial t^2} = 0. \qquad (16)$$

При этом на мезоскопическом уровне $\sigma^m = 0$, а повышение энтропии имеет перегиб. Важно заметить, что в отличие от стационарных неравновесных процессов, которые характеризуются минимумом повышения энтропии, динамически равновесные процессы определяются наименьшей скоростью увеличения энтропии. Следует учитывать, что теорема Пригожина о минимуме повышения энтропии в неравновесном стационарном состоянии не работает для высокоскоростных динамических процессов. Ю. И. Мещеряков обнаружил [2, 3], что экспериментальная кривая откольной прочности имеет максимум как раз в тех условиях, которые выполняются в динамическом равновесии, где скорость роста энтропии минимальна. Это значит, что динамические свойства материалов полностью определяются той стадией макро-мезоэнергообмена, которая успевает пройти в конкретном материале при заданной нагрузке и толщине образца.

Выводы

1. Настоящая теория показывает, что проблема высокоскоростного нагружения материалов не может быть корректно сформулирована без учета процессов структурообразования на мезоскопическом масштабном уровне. Учет мезоскопических структур как коллективного взаимодействия элементарных носителей деформации привносит в систему нелокальные свойства, учет эволюции структуры – обратную связь.

2. Экспериментально обнаруженный при ударном нагружении материала неравновесный энергообмен между макроскопическим и мезоскопическим масштабными уровнями характеризует экспериментально определяемые величины: дисперсию массовой скорости и потерю амплитуды волны на плато импульса сжатия. Включение этих величин в уравнения баланса позволяет прогнозировать структурные переходы в деформируемой среде.

3. Динамические свойства материалов существенно зависят от термодинамики макро-мезоэнергообмена. В динамически равновесном случае наблюдается максимальная откольная прочность материала.

Резюме

Експериментальні дослідження по ударному навантаженню матеріалів показали, що в процесі релаксації напружень ще до початку дисипації виникає енергообмін між макро- і мезоскопічним масштабними рівнями. Задача розповсюдження нестаціонарної хвилі в середовищі, що релаксує, з урахуванням таких мезоскопічних характеристик, як дисперсія масової швид-

кості, та параметрів, що визначають масштаби і типи мезоструктур, сформульована на основі самопогодженого нелокально-гідродинамічного підходу. Установлено, що динамічні властивості матеріалів визначаються термодинамікою макро-мезоенергообміну. Зокрема, експеримент підтвердив, що максимальна відкольна міцність має місце в умовах динамічної рівноваги, яка характеризується максимальною швидкістю зростання ентропії.

1. *Meshcheryakov Yu. I. and Divakov A. K.* Multi-scale kinetics of microstructure and strain-rate dependence of materials // DYMAT Journal. – 1994. – **1**. – P. 271.
2. *Meshcheryakov Yu. I.*, *Divakov A. K.*, and *Zhigacheva N. I.* Role of mesostructure effects in dynamic plasticity and strength in ductile steels // Mater. Phys. Mech. – 2001. – **3**. – P. 63 – 100.
3. *Meshcheryakov Yu. I.* Mesoscopic effects and particle velocity distribution in shock compressed solids // Shock Compression in Condenced Matter / Eds. M. P. Furnish, L. C. Chhabildas, and R. S. Hixson. – AIP Proc. 505. – 1999. – P. 1065 – 1070.
4. *Richardson J. M.* The hydrodynamical equations of one component systems derived from nonequilibrium statistical mechanics // Math. Anal. Appl. – 1960. – **1**. – P. 12 – 60.
5. *Zubarev D. N. and Morozov V. G.* Statistical mechanics of nonlinear hydrodynamic fluctuations // Physics. – 1983. – **120A**. – P. 411.
6. *Хантулева Т. А.* Моделирование быстрых высокоградиентных процессов на основе самосогласованной неравновесной функции распределения // Математическое моделирование. – 1999. – **11**, № 6. – С. 15 – 24.
7. *Khantuleva T. A. and Meshcheryakov Yu. I.* Nonlocal theory of the high-strain-rate processes in structured media // Int. J. Sol. Struct. – 1999. – **36**. – P. 3105 – 3129.
8. *Хантулева Т. А.*, *Мещеряков Ю. И.* Кинетика и нелокальная гидродинамика формирования мезоструктуры в динамически деформируемых средах // Физ. мезомеханика. – 1999. – **2**, № 5. – С. 5 – 17.
9. *Khantuleva T. A.* Microstructure formation in the framework of the nonlocal theory of interfaces // Mater. Phys. Mech. – 2000. – **2**. – P. 51 – 62.
10. *Олимский А. И.*, *Петрунин В. А.* Изменение уплотненного атомного состояния при интенсивном внешнем воздействии // Изв. вузов. Физика. – 1987. – **87**. – С. 82 – 117.

Поступила 05. 07. 2002