УДК 539.3:536.424

МОДЕЛЮВАННЯ ФІЗИКО-МЕХАНІЧНОЇ ПОВЕДІНКИ ТІЛ, ВИГОТОВЛЕНИХ ЗІ СПЛАВІВ З ПАМ'ЯТТЮ ФОРМИ, ЗА НАЯВНОСТІ ЕЛЕКТРИЧНОГО ПОЛЯ

О. Є. ОНИШКО

Інститут прикладних проблем механіки і математики ім. Я. С. Підстригача НАН України, Львів

Побудовано модель кількісного опису термомеханічної поведінки твердих тіл, виготовлених з матеріалів з пам'яттю форми, в області мартенситного перетворення (як прямого, так і оберненого) за силового і температурного навантажень з урахуванням дії електричного поля з допомогою методів механіки суцільного середовища та термодинаміки нерівноважних процесів. Записано систему рівнянь стану. Одержано ключову систему рівнянь моделі. Сформульовано відповідні початкові та граничні умови.

Ключові слова: *математична модель, деформівні тверді тіла, ефект пам'яті форми, мартенситне перетворення.*

Основні положення та термодинамічні параметри стану моделі. Сплави з пам'яттю форми, в яких в певному діапазоні температур під дією теплового та/або механічного навантаження може відбуватися твердофазне мартенситне перетворення [1, 2], широко застосовують у багатьох галузях науки і техніки, зокрема в хірургії та ортопедії для фіксаторів під час лікування переломів. Такі фіксатори суттєво скорочують лікування та підвищують його якість. Використовуючи їх, нагрівати зручніше з допомогою електричного поля [3]. Останнім часом викликають зацікавлення сплави з пам'яттю форми, в яких (зокрема, в мартенситній фазі) проявляються магнетні властивості [4]. Тому необхідно побудувати модель для кількісного опису термомеханічної поведінки твердих тіл, виготовлених з цих сплавів, в області мартенситного перетворення (як прямого, так і оберненого) за силового і температурного навантажень з урахуванням дії електричного поля.

Нижче таку модель побудовано за результатами виконаних раніше розробок [5–9] з використанням методів механіки суцільного середовища [10−12] та термодинаміки нерівноважних процесів [13, 14] за врахування електричного стану відповідної термодинамічної системи. В основі термодинамічного опису розглядуваної системи − гіпотеза локальної термодинамічної рівноваги. За параметри стану, що відображають теплові процеси, вибрані абсолютна температура T та питома ентропія S. Мартенситне перетворення охарактеризовано відносним вмістом мартенситу Ξ та питомою спорідненістю A. Механічні впливи, пов'язані зі зміною об'єму, враховано через інваріанти тензора напружень σ і тензора деформацій e, а обумовлені зміною форми тіла – через інваріанти σ_i та e_i [6–8]. За параметри стану, що відповідають процесу електропровідності, вибрані електричний потенціал Φ та електричний заряд одиниці маси ω [9].

За функцію термодинамічного стану взято вільну енергію F, яка є характеристичною функцією параметрів T, e, e_i, Ξ і Φ. Узагальнене рівняння Ґібса для областей тіла, в яких відбувається фазове перетворення, приведено до вигляду

Контактна особа: О. Є. ОНИШКО, e-mail: onyszko@ukr.net

$$dF = -SdT + 3\sigma de/\rho + \sigma_i de_i/\rho + Ad\Xi - \omega d\Phi. \qquad (1)$$

Рівняння стану. Запишемо рівняння стану моделі для області мартенситного перетворення за малого відхилення від початкового рівноважного стану, прийнявши гіпотезу про природний ненапружений стан: $T = T_0$, $S = S_0$, $e = 0$, $\sigma = 0$, $e_i = 0$, $\sigma_i = 0$, $\Xi = \Xi_0$, $A = A_0$, $\Phi = \Phi_0$, $\omega = 0$. Для цього розкладемо вільну енергію F у степеневий ряд в околі початкового стану за приростами термодинамічних параметрів. Обмежившись квадратичними членами розкладу, одержимо:

$$\begin{gathered} F = F^* - S_0 t + A_0\xi + Ke^2/2\rho + Ge_i^2/2\rho - c_t t^2/2T_0 + \tilde{K}\xi^2/2 + C\varphi^2 - K\alpha te/\rho - \\ -G\alpha' te_i/\rho + \bar{K}t\xi - K\beta e\xi/\rho - G'\beta' e_i\xi/\rho + K'ee_i/\rho + \gamma Ct\varphi + K\eta e\varphi + G\eta' e_i\varphi + \hat{K}\xi\varphi, \end{gathered} \qquad (2)$$

де $t = T - T_0$, $\xi = \Xi - \Xi_0$, $\varphi = \Phi - \Phi_0$.

Скориставшись виразами (1) і (2), отримаємо таку систему рівнянь стану моделі:

$$\begin{gathered} S = -\left(\partial F/\partial T\right)_{e,e_i,\Xi,\Phi} = S_0 + c_t t/T_0 + K\alpha e/\rho + G\alpha' e_i/\rho - \bar{K}\xi - \gamma C\varphi, \\ 3\sigma = \rho\left(\partial F/\partial e\right)_{T,e_i,\Xi,\Phi} = K\left(e - \alpha t - \beta\xi - \eta\varphi\right) + K'e_i, \\ \sigma_i = \rho\left(\partial F/\partial e_i\right)_{T,e,\Xi,\Phi} = G\left(e_i - \alpha' t - \beta'\xi - \eta'\varphi\right) + K'e, \\ A = \left(\partial F/\partial \Xi\right)_{T,e,e_i,\Phi} = A_0 + \tilde{K}\xi + \bar{K}t - K\beta e/\rho - G\beta' e_i/\rho + \hat{K}\varphi, \\ \omega = \left(\partial F/\partial \Phi\right)_{T,e,e_i,\Xi} = C\left(\varphi - \gamma t - \hat{K}\xi\right) + K\eta e/\rho + K\eta' e_i/\rho. \end{gathered} \qquad (3)$$

У співвідношеннях (2), (3) c_t − питома теплоємність; K − модуль всебічного стиску; G − модуль зсуву; α − температурний коефіцієнт об'ємного розширення; α' − коефіцієнт залежності інтенсивності деформацій від температури; $\bar{K}$ − коефіцієнт залежності спорідненості мартенситного перетворення від температури; β − коефіцієнт об'ємного розширення за мартенситного перетворення; β' − коефіцієнт залежності інтенсивності деформацій від вмісту мартенситу; K' − коефіцієнт залежності всебічного стиску σ від інтенсивності деформацій e_i; $\tilde{K}$ − коефіцієнт залежності спорідненості мартенситного перетворення від вмісту мартенситної фази; C – питома електроємність; γ – температурний коефіцієнт зміни електричного потенціалу; η – електрострикційний коефіцієнт об'ємного розширення; η' – коефіцієнт залежності інтенсивності деформацій від електричного потенціалу; $\hat{K}$ – коефіцієнт залежності вмісту мартенситу від електричного потенціалу.

Балансові співвідношення та умови мартенситного перетворення. Узагальнене рівняння Ґібса (1) і рівняння стану (3), сформульовані для розширеного простору параметрів стану, описують множину можливих (допустимих) станів. Для встановлення фізично реалізованого стану за фіксованих значень деформацій, температури і електричного потенціалу скористаємося умовою мінімуму вільної енергії F за відносним вмістом мартенситу Ξ [5]. З неї випливає, що в областях фазового перетворення повинна виконуватись умова

$$\partial F/\partial \Xi = 0, \quad \text{або} \quad A = 0, \qquad (4)$$

з якої і четвертого з рівнянь (3) одержуємо співвідношення, що пов'язує відносний вміст мартенситу з іншими параметрами стану:

$$\tilde{K}\xi + \bar{K}t - K\beta e/\rho - G\beta' e_i/\rho + \hat{K}\varphi = 0. \qquad (5)$$

Система балансових співвідношень моделі складається з рівнянь збереження маси, заряду, кількості руху і повної енергії, рівнянь Максвела для електромагнетного поля та кінетичних рівнянь.

Рівняння збереження маси

$$(\partial\rho/\partial\tau)\nabla\cdot(\rho\mathbf{v})=0\,, \tag{6}$$

де $\mathbf{v}$ – вектор швидкості матеріальних точок; ∇ – набла-оператор у декартовій системі координат.

Рівняння балансу кількості руху:

$$\rho(d\mathbf{v}/d\tau)=\nabla\cdot\hat{\sigma}+\rho\omega\mathbf{E}+\mu_0(\rho\omega\mathbf{v}+\mathbf{j})\times\mathbf{H}\,, \tag{7}$$

де $\hat{\sigma}$ – тензор напружень; $\rho\omega\mathbf{E}+\mu_0(\rho\omega\mathbf{v}+\mathbf{j})\times\mathbf{H}$ – сила Лоренца, віднесена до одиниці об’єму; $\mathbf{E}$ – напруженість електричного поля; μ_0 – магнетна стала; $\mathbf{j}$ – густина струму провідності; $\mathbf{H}$ – напруженість магнетного поля.

Напруженості електричного і магнетного полів в області тіла задовольняють рівняння Максвела

$$\nabla\times\mathbf{H}=\varepsilon_0(\partial\mathbf{E}/\partial\tau)+\rho\omega\mathbf{v}+\mathbf{j},\quad \nabla\times\mathbf{E}=-\mu_0\frac{\partial\mathbf{H}}{\partial\tau},\quad \nabla\cdot\mathbf{H}=0,\quad \varepsilon_0\nabla\cdot\mathbf{E}=\rho\omega, \tag{8}$$

де ε_0 – діелектрична стала.

Зі співвідношень (8) випливають рівняння збереження електричних зарядів

$$\rho(d\omega/d\tau)=\nabla\cdot\mathbf{j} \tag{9}$$

і збереження густини електромагнетної енергії

$$\left[\partial\left(\varepsilon_0E^2+\mu_0H^2\right)/\partial\tau\right]/2=-\nabla\cdot(\mathbf{E}\times\mathbf{H})-(\rho\omega\mathbf{v}+\mathbf{j})\cdot\mathbf{E}\,. \tag{10}$$

Рівняння балансу повної енергії має вигляд

$$\partial W/\partial\tau=-\nabla\cdot\mathbf{J}_W+\left(\varepsilon_0E^2+\mu_0H^2\right)/2\,, \tag{11}$$

де $W=\rho\left(U+\mathbf{v}^2/2\right)$ – густина повної енергії; U – питома внутрішня енергія, $\mathbf{v}^2/2$ – питома кінетична енергія; $\mathbf{J}_W=\mathbf{J}_Q-\hat{\sigma}\cdot\mathbf{v}+\mathbf{E}\times\mathbf{H}+\Phi\mathbf{j}+W\mathbf{v}$ – потік повної енергії, $\mathbf{J}_Q$ – тепловий потік, $\hat{\sigma}\cdot\mathbf{v}$ – потік енергії, обумовлений механічною роботою, $\mathbf{E}\times\mathbf{H}$ − потік електромагнетної енергії, $\Phi\mathbf{j}$ − потік енергії, спричинений дифузією електричних зарядів, $W\mathbf{v}$ – конвективна складова потоку повної енергії.

Зі співвідношень (7), (9), (11) і (1) виведемо рівняння балансу ентропії, яке з урахуванням виразу (5) набуде вигляду

$$\rho(dS/d\tau)=-\nabla\cdot\mathbf{J}_S+\sigma_S\,, \tag{12}$$

де $\mathbf{J}_S=\mathbf{J}_Q/T$ – потік ентропії; $\sigma_S=\left(\mathbf{X}_Q\cdot\mathbf{J}_Q+\mathbf{X}_j\cdot\mathbf{j}\right)/T$ – виробництво ентропії, $\mathbf{X}_Q=-\nabla T/T$ – термодинамічна сила, спряжена з тепловим потоком $\mathbf{J}_Q$, $\mathbf{X}_j=\mathbf{E}-\nabla\Phi+\mu_0\mathbf{v}\times\mathbf{H}$ – термодинамічна сила, спряжена з електричним струмом.

Згідно з лінійною теорією Онзагера [14] введені такі кінетичні рівняння:

$$\mathbf{J}_Q=-\lambda\nabla t+q\mathbf{j},\quad \mathbf{j}=\vartheta(\mathbf{E}-\nabla\varphi+\mu_0\mathbf{v}\times\mathbf{H})-\chi\nabla t\,, \tag{13}$$

де λ, ϑ – коефіцієнти тепло- та електропровідності; q, χ – коефіцієнти, що характеризують термоелектричні ефекти.

Зазначимо, що в цьому варіанті моделі вважали, що структурні перетворення відбуваються без суттєвого поглинання чи виділення енергії, тому й знехтували відповідні члени в рівняннях балансу повної енергії та ентропії.

Визначальна система рівнянь моделі. Виходячи з наведених вище балансових співвідношень (7), (9), (11) і (12), рівнянь стану (3), кінетичних рівнянь (13), умови (5), рівнянь Максвела (8) і співвідношень Коші, запишемо систему диференціальних рівнянь для розв'язувальних функцій в області тіла, в якій протікає мартенситне перетворення. За розв'язувальні функції візьмемо вектор переміщень $\mathbf{u}$, температуру T, відносний вміст мартенситу Ξ та електричний потенціал Φ. Надалі нехтуватимемо різницю між локальною та субстанціональною похідними і замінимо густину ρ усередненим значенням ρ_0. У результаті отримаємо:

$$
\begin{gathered}
3\rho_0\left(\partial^2\mathbf{u}/\partial\tau^2\right) = -2G\beta'\nabla\xi\cdot\hat{\varepsilon}/e_i + 2G\beta'\xi\nabla e_i\cdot\hat{\varepsilon}/e_i^2 - K\nabla(\alpha t+\eta\varphi)+ \\
+\left[K-2G(e_i-\beta'\xi-\eta'\varphi)/e_i\right]\nabla(\nabla\cdot\mathbf{u})/3-\left[K\beta-2G\beta'(\nabla\cdot\mathbf{u})/3\right]\nabla\xi+ \\
+\left(K-2G\beta'\xi/e_i^2\right)\nabla e_i+\left[\rho_0 C\left(\varphi-\gamma t-\hat{K}\xi\right)+\eta K\nabla\cdot\mathbf{u}\right]\left[\mathbf{E}+\mu_0(\partial\mathbf{u}/\partial\tau)\cdot\mathbf{H}\right]+ \\
+\mu_0\left[\lambda\left(\mathbf{E}-\nabla\varphi+\mu_0(\partial\mathbf{u}/\partial\tau)\cdot\mathbf{H}\right)\right]\cdot\mathbf{H}+G(e_i-\beta'\xi)\left[\nabla^2\mathbf{u}+\nabla(\nabla\cdot\mathbf{u})\right]/e_i,
\end{gathered}
\tag{14}
$$

$$
\begin{gathered}
\kappa\nabla^2 t=\partial t/\partial\tau+K^*\partial(\nabla\cdot\mathbf{u})/\partial\tau-\bar{K}^*\partial\xi/\partial\tau-\hat{K}^*\partial\varphi/\partial\tau- \\
-\lambda^*\left[\mathbf{E}-\nabla\varphi+\mu_0(\partial\mathbf{u}/\partial\tau)\cdot\mathbf{H}\right]^2,
\end{gathered}
\tag{15}
$$

$$
\lambda\nabla^2\varphi=(\partial/\partial\tau+\lambda/\varepsilon_0)\left[\rho_0 C\left(\varphi-\gamma t-\hat{K}\xi\right)+\eta K\nabla\cdot\mathbf{u}\right]+\lambda\mu_0\nabla\left[(\partial\mathbf{u}/\partial\tau)\cdot\mathbf{H}\right], \tag{16}
$$

$$
\begin{gathered}
\operatorname{rot}\mathbf{H}=\varepsilon_0\,\partial\mathbf{E}/\partial\tau+\left[\rho_0 C\left(\varphi-\gamma t-\hat{K}\xi\right)+\eta K\nabla\cdot\mathbf{u}\right](\partial\mathbf{u}/\partial\tau)+ \\
+\lambda\left[\mathbf{E}-\nabla\varphi+\mu_0(\partial\mathbf{u}/\partial\tau)\cdot\mathbf{H}\right],
\end{gathered}
\tag{17}
$$

$$
\nabla\times\mathbf{E}=-\mu_0(\partial\mathbf{H}/\partial\tau),\quad \nabla\cdot\mathbf{H}=0, \tag{18}
$$

$$
\varepsilon_0\nabla\cdot\mathbf{E}=\rho_0 C\left(\varphi-\gamma t-\hat{K}\xi\right)+\eta K\nabla\cdot\mathbf{u}, \tag{19}
$$

$$
\bar{K}t-K\beta(\nabla\cdot\mathbf{u})/3\rho_0-G\beta' e_i/\rho_0+\hat{K}\varphi+\tilde{K}\xi=0. \tag{20}
$$

Тут $\nabla^2=\nabla\cdot\nabla$ – оператор Лапласа; $\hat{\varepsilon}$ – тензор деформацій; $\kappa=\lambda/(\rho_0 c_t)$; $K^*=KT_0\alpha/(3\rho_0 c_t)$; $\bar{K}^*=\bar{K}T_0/c_t$; $\hat{K}^*=\hat{K}T_0/c_t$; $\lambda^*=\lambda T_0/c_t$.

Граничні та початкові умови на параметри стану моделі. Систему рівнянь (14)–(20) необхідно доповнити відповідними граничними і початковими умовами. Приймаємо, що в початковий момент часу в тілі відсутні фазові перетворення, тому початкові умови можна подати у вигляді

$$
\begin{gathered}
\mathbf{u}\big|_{\tau=0}=\mathbf{u}_0,\ \left.\frac{\partial\mathbf{u}}{\partial\tau}\right|_{\tau=0}=\mathbf{f},\ T\big|_{\tau=0}=T_0,\ \Phi\big|_{\tau=0}=T_0, \\
\mathbf{E}\big|_{\tau=0}=0,\ \mathbf{H}\big|_{\tau=0}=0,\ \mathbf{E}_c\big|_{\tau=0}=0,\ \mathbf{H}_c\big|_{\tau=0}=0,
\end{gathered}
\tag{21}
$$

де $\mathbf{E}_c$, $\mathbf{H}_c$ – напруженості електричного і магнетного полів у зовнішньому середовищі. На поверхні тіла необхідно задати вектор механічних напружень або вектор переміщень (можливі також мішані умови):

$$
\hat{\sigma}\cdot\mathbf{n}=\mathbf{p}+\Omega'(\mathbf{E}+\mathbf{E}_c)/2+\mu_0(\Omega'\mathbf{v}_l+\mathbf{i})\times(\mathbf{H}+\mathbf{H}_c)/2,\quad \mathbf{u}=\mathbf{u}_b. \tag{22}
$$

Тут $\mathbf{n}$ – вектор зовнішньої нормалі; $\mathbf{p}$ – вектор зовнішніх зусиль; $\mathbf{u}_b$ – вектор переміщень на поверхні тіла; Ω' – густина поверхневих зарядів; $\mathbf{i}$ – густина поверхневих струмів; $\mathbf{v}_l$ – проекція вектора $\mathbf{v}$ на площину, дотичну до поверхні тіла.

Слід також задати теплові граничні умови, за які можна прийняти відомі умови першого, другого або третього роду [11]. В нашому випадку вони мають вигляд

$$T = T_b,\ -\lambda\left(\nabla T\right)\cdot \mathbf{n} = \mathbf{J}_Q \cdot \mathbf{n},\ \left(\nabla T\right)\cdot \mathbf{n} = h_0\left(T - T_c\right), \tag{23}$$

де T_b – задана температура на поверхні тіла; h_0 – відносний коефіцієнт теплообміну; T_c – температура зовнішнього середовища за конвективного теплообміну.

ВИСНОВКИ

Отримана за послідовним термодинамічним підходом нелінійна система рівнянь (14)–(20) разом з відповідними крайовими умовами (21)–(23) складає замкнуту розв'язувальну систему рівнянь моделі для кількісного опису поведінки тіл, виготовлених з матеріалів з пам'яттю форми під термосиловим навантаженням з урахуванням впливу електричного поля.

РЕЗЮМЕ. Построена модель количественного описания термомеханического поведения твердых тел, изготовленных из материалов с памятью формы, в области мартенситного превращения при силовом и температурном нагружениях с учетом воздействия электрического поля, с использованием методов механики сплошной среды и термодинамики неравновесных процессов. Записана система уравнений состояния. Получена ключевая система уравнений модели. Сформулированы соответствующие начальные и граничные условия.

SUMMARY. The model for quantitative description of the thermomechanical behavior of shape memory solids in the martensitic conversion area under power and thermal loading with account of the electric field influence, built using methods of the continuum mechanics and thermodynamics of nonequilibrium processes, is proposed. The state equations system is written. The key system of the model equations is received. The corresponding initial and boundary conditions are formulated.

1. *Лихачев В. А., Кузьмин С. Л., Каменцева З. П.* Эффект памяти формы. – Л.: Изд-во Ленинград. ун-та, 1987. – 316 с.
2. *Сплавы* с эффектом памяти формы / Под ред. Х. Фунакубо – М.: Металлургия, 1990. – 224 с.
3. *Musialek J., Filip P., and Nieslanik J.* Titanium-nickel shape memory clamps in small bone surgery // Arch. Orthop. Trauma Surg. – 1998. – **117**. – P. 341–344.
4. *A three-dimensional* phenomenological model for magnetic shape memory alloys / F. Auricchio, A.-L. Bessoud, A. Reali, U. Stefanelli // GAMM-Mitt. – 2011. – **34**, № 1. – P. 90–96.
5. *Асташкін В. І., Будз С. Ф., Онишко О. Є.* Кількісний опис фізико-механічних процесів у матеріалах з пам'яттю форми // Фіз.-хім. механіка матеріалів. – 1994. – **30**, № 4. – С. 60–66.

   (*Astashkin A. I., Budz S. F., and Onyshko O. E.* Quantitative description of physicomechanical processes in shape-memory materials // Materials Science. − 1994. – **30**, № 4. – P. 453–459.)
6. *Моделирование* с использованием инвариантов тензоров напряжений и деформаций термомеханических процессов в твердых телах при технологическом нагреве / В. Асташкин, Б. Боженко, С. Будз, А. Онышко // Projektowanie procesów i systemów technologicznych. – Lublin: Soc. Sci. Lublinensis, 2003. – C. 164–170.
7. *Моделювання* з використанням інваріантів тензорів напружень і деформацій термомеханічних процесів у деформівних твердих тілах при врахуванні структурних перетворень / В. Асташкін, О. Гачкевич, О. Онишко, Б. Боженко // Машинознавство. – 2003. – № 11. – С. 14–17.
8. *Онишко О., Боженко Б., Новацький В.* Моделювання термомеханічних явищ в матеріалах з пам'яттю форми // Математичні проблеми механіки неоднорідних структур. – Львів, 2003. – С. 71–73.
9. *Бурак Я. Й., Галапац Б. П., Гнідець Б. М.* Фізико-механічні процеси в електропровідних тілах. – К.: Наук. думка, 1978. – 232 с.
10. *Гольденблат И. И.* Нелинейные проблемы теории упругости. – М.: Наука, 1969. – 336 с.
11. *Седов Л. И.* Механика сплошной среды. – М.: Наука, 1973. – Т. 1. – 536 с.
12. *Гринфельд М. А.* Методы механики сплошной среды в теории фазовых превращений. – М.: Наука, 1990. – 312 с.
13. *Де Гроот С., Мазур П.* Неравновесная термодинамика. – М.: Мир, 1964. – 456 с.
14. *Дьярмати И.* Неравновесная термодинамика. – М.: Мир, 1974. – 304 с.

Одержано 11.10.2016