Mérnökgeológia-Kőzetmechanika 2013 (Szerk: Török Á., Görög P. & Vásárhelyi B.)
Oldalak: 333-338

Szilárd testek rugalmas, hőtágulási és képlékeny folyamatainak termodinamikája

Thermodynamics of elastic, thermal expansion and plastic processes of solid bodies

Fülöp Tamás
BME Energetikai Gépek és Rendszerek Tanszék, 1521 Budapest, Pf. 91, fulop@energia.bme.hu
Montavid Termodinamikai Kutatócsoport, 1112 Budapest, Igmándi u. 26.

Ván Péter
MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont, 1525 Budapest, Pf. 49, van.peter@wigner.mta.hu
BME Energetikai Gépek és Rendszerek Tanszék, 1521 Budapest, Pf. 91.
Montavid Termodinamikai Kutatócsoport, 1112 Budapest, Igmándi u. 26.

Csatár Attila
VM Mezőgazdasági Gépesítési Intézet, 2100 Gödöllő, Tessedik S. u. 4, acsatar@fvmmi.hu
Montavid Termodinamikai Kutatócsoport, 1112 Budapest, Igmándi u. 26.

ÖSSZEFOGLALÁS: A szilárd testek termodinamikai tárgyalásának egyik alappillére a szilárd közeg mozgásainak leírása. Az irodalomban hagyományosan elterjedt közegkinematika számos problémáját nemrég sikerült (kutatócsoportunknak) kiküszöbölni. Erre az alapra újra fel kell építeni a termodinamikát, és ennek a munkának az eddig elért eredményeiről számolunk itt be. A rugalmas, hőtágulási és képlékeny folyamatokat együttesen leíró termodinamikai egyenletrendszert kisdeformációs közelítésben ismertetjük, oldjuk meg egy numerikus példán, majd az egyes viselkedéseket egy kísérlet eredményein keresztül mutatjuk be.

Kulcsszavak: rugalmasság, hőtágulás, képlékenyedés, termodinamika

ABSTRACT: The description of the motion of a solid continuum is a basic ingredient of the thermodynamics of solid bodies. The several problems of the widespread traditional approach to the kinematic quantities of continua has been recently successfully eliminated (by our research group). Thermodynamics has to be rebuilt upon this basis, and, here, we report on the results of this work that have been reached so far. We present the thermodynamical system of equations describing elastic, thermal expansion and plastic processes together, shown in the small deformation approximation, then we solve the equations in a numerical example, and illustrate the various types of behaviour via the results of an experiment.

keywords: elasticity, thermal expansion, plasticity, thermodynamics

1 BEVEZETÉS

Jelen sorokban a szilárd testek közönséges és kontinuum-termodinamikája területén folytatott tevékenységünk [Fülöp & Ván (2012), Fülöp (2011), Ván & Fülöp (2012), Ván & Fülöp (2013)] nemrég elért eredményeiről kívánunk egy rövid ismertetőt nyújtani.

Az elméleti leírásunk által jelenleg lefedett jelenségkörök a következőek:

- rugalmasság, melynek során a mechanikai energia megmarad,
- reológia, mely a mechanikai terhelésekre adott késleltetett választ jelenti – pl. viszkózus csillapítás –, melynek során a mechanikai energia részben disszipálódik,
- képlékenyedés, mely a szilárd szerkezet mechanikai terhelésre bekövetkező tartós változása, és szintén energiadisszipációval társul,
- hőtágulás, és a következményeként kialakuló hőfeszültség,
- hővezetés, akár a Fourier-törvénynek megfelelő, akár valamely általánosabb konstitúciós törvényszerűség által vezérelt.

Bizonyos más jelenségek kapcsán egyelőre csak bizonyos kezdeti eredményeket értünk el:

- szemcsés anyagok (kontinuum-leírást alkalmazunk) (bár a szemcsésség egyes aspektusai tárgyalhatók gradiens-elmélettel, azaz térderiváltakat is tartalmazó anyagtörvényekkel),
- porozitás, víztartalom, kémiai jelenségek,
- károsodás és tönkremenetel (mely azonban eddigi eredményeink szerint a jövőben megérthető lehet a termodinamikai stabilitás elvesztéseként).

Néhány jellemző momentum, amely megközelítésünket megkülönbözteti más kontinuum-leírásoktól:

- szabályos tenzori tárgyalás, mely lehetővé tesz a klasszikus egytengelyű, egyszerű nyírási stb. terheléseknél jóval komplexebb terheléstípusat is,
- nemcsak kis, hanem nagy (rugalmas, hőtágulási, képlékeny) deformációk is,
- nemcsak kvázisztatikus folyamatok, hanem dinamikai egyenletrendszer diktálta pontos időfejlődés, melynek segítségével gyors folyamatok és erős irreverzibilitás is kezelhetőek,
- mindennemű segéd-elemek (vonatkoztatási rendszer, referenciaidő, referenciakonfiguráció, referenciaállapot, referenciahőmérséklet stb.) mellőzése, melyek kényelmesebbé teszik a leírást de mesterségesen és fizikailag eltorzítják – így az objektivitási elvnek automatikusan eleget teszünk, és biztosítjuk, hogy az elmélet lényeghordozó, fizikai mennyiségekből épül fel (kényelemsegítő speciális mennyiségek pedig az egyes konkrét problémákhoz illeszkedve, megoldássegítő céllal engedhetőek meg és célszerűek),
- minden fizikai fogalmat matematikai fogalommal modellezünk (noha a modell mindig megkülönböztetendő a valóságtól), mégpedig nemcsak egy-egy konkrét elrendezés kap matematikai modellt, hanem az egész általános elmélet maga egy matematikai modell [Matolcsi (1984), Matolcsi (1986), Matolcsi (1993)], melynek következményeként a matematika szabályai be lesznek tartva és a hallgatólagos feltételezések el lesznek kerülve.

2 A KINEMATIKAI ALAPOK

Szilárd és folyékony kontinuumok esetén egyaránt igaz, hogy a közeg mozgása meghatározza bármely két anyagi pont pillanatnyi távolságát. Ez egy ún. pillanatnyi metrikát (metrikus tenzormezőt) definiál az anyagi sokaságon [Fülöp & Ván (2012), Fülöp (2011)]. E pillanatnyi metrika változása az $\mathbf{L}$ sebességgradiens segítségével számolható. Szilárd testekre az újszerű és fontos fogalom a $\tilde{\mathbf{g}}$ relaxált (nyugalmi, saját-) metrika, mely olyan állapotban adja meg az anyagi pontok páronkénti távolságait, amikor a test egy feszültségmentes és relaxált állapotban van. Egy ilyen állapotban tehát $\tilde{\mathbf{h}} = \tilde{\mathbf{g}}$. A relaxált metrika a test relaxált alakját jellemzi. A rugalmas állapotjellemző céljára bevezethető kinematikai mennyiség a két metrika eltérését mérő

$$\tilde{\mathbf{D}} = \frac{1}{2}\ln \tilde{\mathbf{g}}^{-1}\tilde{\mathbf{h}} \tag{1}$$

rugalmas deformáltság, és a $\tilde{\boldsymbol{\sigma}}$ rugalmas feszültséget e mennyiség függvényének várjuk (Hooke-modell esetén lineáris függvénye, más esetben nemlineáris tenzor-tenzor-függvény). Ezzel a logaritmikus definícióval a rugalmas deformáltság a Hencky-deformáció referenciaobjektum-mentes, téridő-kompatibilis, objektív általánosításának bizonyul.

Rugalmas folyamatok során a relaxált metrika állandó, de ismerünk jelenségeket, melyek során a relaxált metrika változik. A hőtágulás nem más, mint hogy a testek feszültségmentes, relaxált mérete hőmérsékletfüggő. Kinematikai tárgyalásunkban ez egy hőmérsékletfüggő relaxált metrikával fogalmazható meg: .

Ha a közeg izotrop (amit a továbbiakban fel fogunk tételezni, a képletek egyszerűbb, átláthatóbb mivolta érdekében), akkor ez a hőmérsékletfüggés egyszerű skalár átskálázás,

$$\tilde{\mathbf{g}}(T_2) = \mathbf{\Lambda}(T_1, T_2)^2\tilde{\mathbf{g}}(T_1), \qquad \alpha(T) = \lim_{\Delta T \to 0}\frac{\mathbf{\Lambda}(T, T+\Delta T) - \mathbf{1}}{\Delta T}, \tag{2}$$

ahol utóbbi képlet a lineáris hőtágulási együttható definícióját mutatja. Következésképp, ha egy anyagi pont helyén a hőmérséklet időben változik, akkor

$$\dot{\tilde{\mathbf{g}}} = \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}T}\tilde{\mathbf{g}}\right)\dot{T} = 2\alpha(T)\dot{T}\tilde{\mathbf{g}} \tag{3}$$

teljesül a relaxált metrika együttmozgó időderiváltjára.

A képlékenyedés (melynek egy hagyományos összefoglalóját ld. a Rusinko & Rusinko (2011) könyvben) megközelítésünkben szintén a $\tilde{\mathbf{g}}$ relaxált szerkezet egyfajta változásaként fogható fel: elegendően erős mechanikai feszültség hatására a szilárd test relaxált alakja – és metrikája – tartós változást szenved. Ez a változás kinematikai oldalról egy szimmetrikus tenzor, a $\tilde{\mathbf{Z}}$ képlékenyedési sebesség révén fejezhető ki. Összességében, az egyszerűség kedvéért a kisdeformációs közelítésre szorítkozva, amikor is $\|\mathbf{D}\| \ll 1$, a

$$\mathbf{L}^{\mathrm{sym}} = \dot{\mathbf{D}} + \alpha\dot{T}\mathbf{1} + \mathbf{Z} \tag{4}$$

kinematikai fejlődési egyenlet vezethető le a szóbanforgó tenzorok (az $\mathbf{L}$ sebességgradiens szimmetrikus része, a rugalmas változási gyorsaság, a hőtágulás sebessége és a képlékenyedési sebesség) téridő- (avagy laboratóriumirendszer-beli) alakja között. Ehhez az áttéréshez a tenzorok anyagi és téridőalakja közötti kapcsolatot a deformációgradiens általánosításaként felfogható $\mathbf{J}$ világvonal-gradiens szolgáltatja, a világvonalak időderiváltja pedig a sebességmezőt nyújtja. A (4) egyenlet véges deformációs változata egy ennél kissé bonyolultabb, $\mathbf{D}$-t nemlineárisan tartalmazó képlet. Megjegyezzük, hogy kisdeformációs közelítésben a ρ sűrűség állandó.

A megnyúlások, a deformációk referenciaidő-függő fogalmak, ezért konsitutív és más alapegyenletben nem szerepelhetnek, ezek a (4) egyenlet egyes tagjainak időintegráljaiként értelmezhetőek: a teljes megnyúlás a baloldal integrálja, a rugalmas megnyúlás a jobboldal első tagjáé, a hőtágulási deformáció a második tagé, a képlékeny nyúlás pedig a harmadiké.

3 MECHANIKA ÉS TERMODINAMIKA

Dinamikai elméletünk felépítését azzal kezdjük, hogy mit várunk a mechanikai oldalon: a rugalmas konstitutív egyenletünk legyen pl. az egyszerű lineáris (Hooke-) eset:

$$\boldsymbol{\sigma} = U^{\mathrm{dev}}\boldsymbol{D}^{\mathrm{dev}} + U^{\mathrm{sph}}\boldsymbol{D}^{\mathrm{sph}}, \tag{5}$$

ahol

$$\boldsymbol{D}^{\mathrm{sph}} = \frac{1}{3}(\mathrm{tr}\mathbf{D})\mathbf{1}, \qquad \boldsymbol{D}^{\mathrm{dev}} = \mathbf{D} - \mathbf{D}^{\mathrm{sph}}, \qquad U^{\mathrm{sph}} = 3K, \qquad U^{\mathrm{dev}} = 2G. \tag{6}$$

Innen könnyen megmutatható, hogy a termorugalmasság klasszikus Duhamel-Neumann-képlete [Lubarda (2004)] egy speciális esetként adódik: egyszerűen csak át kell térnünk a rugalmas deformáltság változóról a teljes deformációra, és feltételeznünk, hogy egy kezdeti időpillanatban a rugalmas deformáltság nulla, továbbá hogy képlékeny változás nem történik.

A termodinamika felé tett első lépésként az első főtételt, a belső energia mérlegét írjuk elő:

$$\rho\dot{e} = -\mathbf{j}_e \cdot \nabla + \mathrm{tr}\boldsymbol{\sigma}\mathbf{L}^{\mathrm{sym}} \tag{7}$$

ahol $e(\mathbf{D}, T)$ a fajlagos belső energia, $\mathbf{j}_e$ az árama (azaz a hőáram), alább mindkettejüket konstitutíve meg fogjuk adni.

Ezután egy olyan $s(\mathbf{D}, T)$ fajlagos entrópiafüggvényt keresünk, mely termodinamikailag konzisztens e-vel, ahol $\mathbf{j}_s = \frac{\mathbf{j}_e}{T}$-t teszünk fel a $\mathbf{j}_s$ entrópiaáramra, továbbá a

$$\rho\dot{s} = -\mathbf{j}_s \cdot \nabla + \sigma_s \tag{8}$$

entrópiamérlegben szereplő entrópiaprodukció pozitív definitségét, $\sigma_s \geq 0$ -t (a második főtétel következményét) is konstitutíve kell majd biztosítanunk.

Abban a speciális esetben, amikor a belsőenergia-függvény hőmérsékletfüggése egy állandó c fajhőt kifejező tagban jelentkezik csak, a (4) egyenlet felhasználásával a kívánt belső energia és entrópia

$$e = cT + \frac{U^{\mathrm{dev}}}{2\rho}\mathrm{tr}(\mathbf{D}^{\mathrm{dev}})^2 + \frac{U^{\mathrm{sph}}}{2\rho}\mathrm{tr}(\mathbf{D}^{\mathrm{sph}})^2 + \frac{U^{\mathrm{sph}}}{\rho}T\alpha\mathrm{tr}\mathbf{D}^{\mathrm{sph}}, \tag{9}$$

$$s = c\ln\frac{T}{T_*} + \frac{U^{\mathrm{sph}}}{\rho}\alpha\mathrm{tr}\mathbf{D}^{\mathrm{sph}} + s_* \tag{10}$$

egy tetszőleges T_* hőmérsékletértékkel és s_* konstanssal. A megfelelő entrópiaprodukció pedig

$$\sigma_s = \nabla\frac{1}{T}\cdot\mathbf{j}_e + \frac{1}{T}\mathrm{tr}\boldsymbol{\sigma}\mathbf{Z} = \nabla\frac{1}{T}\cdot\mathbf{j}_e + \frac{U^{\mathrm{dev}}}{T}\mathrm{tr}\mathbf{D}^{\mathrm{dev}}\mathbf{Z} + \frac{U^{\mathrm{sph}}}{T}\mathrm{tr}\mathbf{D}^{\mathrm{sph}}\mathbf{Z} \tag{11}$$

-nek adódik, ez arra utal, hogy rugalmas és hőtágulási folyamat során nem termelődik irreverzibilitás, csak képlékenyedés során (illetve a hővezetési tag révén).

Egy egyszerű konstitutív választás, mely biztosítja eme entrópiaprodukció pozitív definitségét, az, amikor hővezetésre a standard

$$\mathbf{j}_e = \lambda\nabla\frac{1}{T} \tag{12}$$

Fourier-modellt tekintjük, pl. egy állandó λ hővezetési együtthatóval, a képlékenyedést pedig

$$\mathbf{Z} = \Gamma\dot{\mathbf{D}}^{\mathrm{dev}}, \qquad \Gamma = \gamma H(\mathrm{tr}(\mathbf{D}^{\mathrm{dev}})^2 - B)H(\mathrm{tr}(\mathbf{D}^{\mathrm{dev}})^2) \tag{13}$$

írja le, ahol γ és B pozitív konstansok, H pedig a Heaviside-féle egységugrásfüggvény.

(13) egy természetes és jól ismert képlékenyedéselméletet ír le:

- a képlékenyedési sebesség arányos a rugalmas változási gyorsasággal,
- a képlékenységi határfeltétel a von Mises-féle (vegyük észre, hogy most a feszültség lineáris függvénye),
- a képlékenyedés tehermentesítés során ki van kapcsolódva (ezt az entrópiaprodukció pozitív definitása, azaz végeredményben a termodinamika második feltétele követeli meg).

Hőmérsékletfüggő U^{sph}, U^{dev}, α, c együtthatókra, általánosabb rugalmas energiára, nagy deformációkra és anizotrop anyagokra hasonló, csak némileg bonyolultabb képletek vezethetőek le.

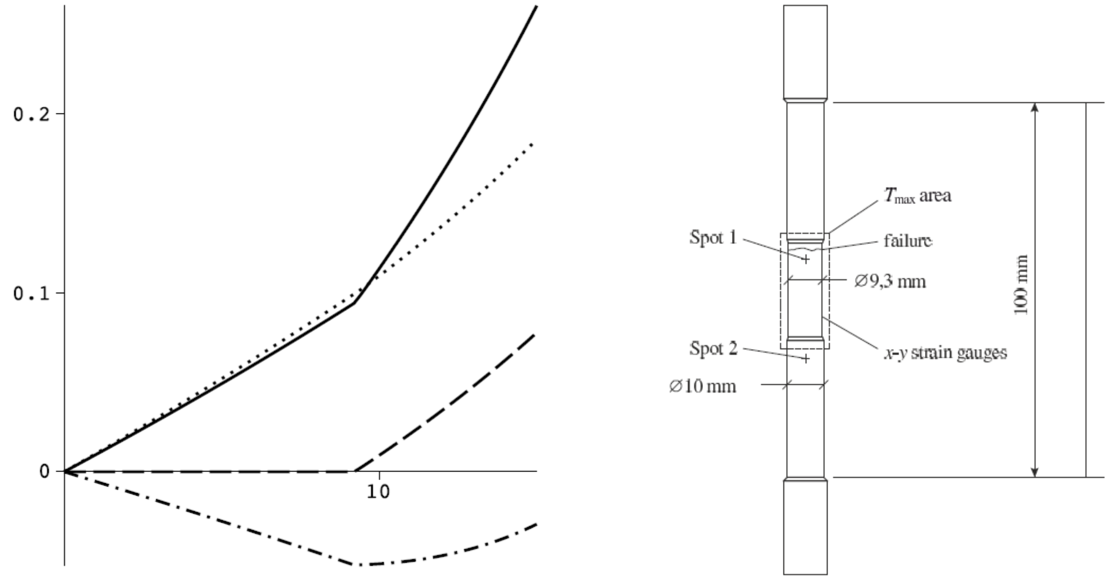
A reológia a belső változók (dinamikai szabadsági fokok [Verhás (1997)]) módszertanával adható hozzá az elmélethez. A levezetés részleteit [Ván & Fülöp (2013)] mellőzve, csak röviden megemlítjük, hogy az eljárás hasonló a Ván & Fülöp (2012)-ben követetthez: feltételezzük egy további állapotjellemző, egy ξ szimmetrikus tenzormező létét, és előbbi entrópiafüggvényünket egy kvadratikus konkáv taggal bővítjük ki:

$$s = s_{\mathrm{previous}} - \frac{1}{2}\mathrm{tr}\xi^2. \tag{14}$$

Ezzel párhuzamosan a feszültségben is megengedünk egy extra, nemrugalmas eredetű tagot. Ha eltekintünk a képlékenyedéstől és a hőtágulástól, az entrópiaprodukció pozitív definitségét lineáris onsageri keretben biztosítva, állandó hőmérséklet esetén a belső változót kiküszöbölve egy lineáris reológiai modellt kapunk, melyben σ, $\dot{\sigma}$, $\mathbf{D}$, $\dot{\mathbf{D}}$, $\ddot{\mathbf{D}}$ szerepelnek. Vagyis a Poynting–Thomson–Zener- és a Jeffreys-modell közös általánosítására jutunk, melyet a levezetés megalapozója után Verhás-modellnek nevezhetünk.

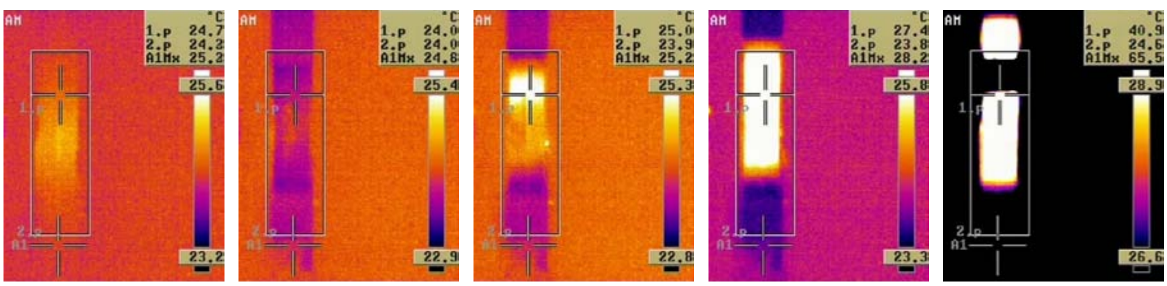
4 EGY KÍSÉRLETI ILLUSZTRÁCIÓ

Fenti konstitutív és mérlegegyenleteinkhez hozzátéve a $\rho\dot{\mathbf{v}} = \nabla\cdot\boldsymbol{\sigma}$ mechanikai mozgásegyenletet vagy annak $\nabla\cdot\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0}$ erőegyensúlyi közelítését, egy záruló dinamikai egyenletrendszer áll előttünk. Így bármely konkrét folyamatot meghatározhatunk, elegendő kezdeti és peremfeltétel megadása esetén. Az 1.a ábra egy időben egyenletesen növelt erővel egytengelyűen terhelt, hengerszerű próbatest megnyúlásait és hőmérsékletét mutatja, az idő függvényében. Ezeket az eredményeket kísérletileg az 1.b ábrán vázolt, műanyag próbatesten végzett húzókísérletében illusztráltuk. Az öt fő folyamatszakaszt a 2. ábrán látható pillanatfelvételek mutatják be.



a b

1. ábra. a: megnyúlások és hőmérséklet az idő függvényében, egy fiktív egytengelyű húzókísérletben (numerikus számítás). A hőmérséklet (pont-szaggatott vonal) először csökken – egy adiabatikusan táguló gázhoz hasonlóan –, majd növekszik – a képlékeny disszipációnak köszönhetően –, a rugalmas megnyúlás (pontozott vonal) a növekvő feszültségnek megfelelően növekszik, a képlékeny megnyúlás (szaggatott vonal) csak a kritikus feszültség fölött indul meg, innentől kezdve a teljes megnyúlás (folytonos vonal) nagyobb meredekséggel nő. **b**: a kísérlet vázlata. A minta középső része vékonyabb, és egy hőkamera filmezte. Két megjelölt pontban a mért hőmérsékletértékek számszerűleg is ki voltak jelezve (ld. 2. ábra), a megfigyelt téglalapbeli maximális hőmérsékletértékkel egyetemben. *(**a**: Strains and temperature as a function of time, for a (fictious) uniaxially stretched rod (numerical calculation). Temperature (dash-dotted line) first decreases – like for an adiabatically expanding gas – and then increases – due to plastic dissipation – , elastic strain (dotted line) increases as it follows the increased stress, plastic strain (dashed line) appears only above the critical stress, causing that the total strain (solid line) starts to increase faster. **b**: The outline of the experiment. The middle part of the sample was thinner, and was monitored by a thermal camera. Temperature values at the two displayed spots were numerically displayed (see Fig. 2), together with the maximal temperature in the rectangular observing area.)*



2. ábra. A hőkamera pillanatfelvételei. Az első mutatja a kezdeti állapotot, aztán a kvázi-adiabatikus lehűlés figyelhető meg, majd hődisszipáció jelenik meg a képlékeny változás következményeként, később a képlékeny változás kiterjed az egész kikönnyített mintaszakaszra, végül a próbatest elszakad. *(Snapshots taken by the thermal camera. The first one shows the initial state, then the quasi-adiabatic cooling is observable, then heat dissipation appears due to plastic change, then the plastic change extends to the whole thinner part of the sample, and finally failure occurs.)*

5 ÖSSZEFOGLALÁS

Azt kívántuk illusztrálni, hogy a nemrég javasolt új közegkinematikai megközelítésünkre valóban alapozhatunk mechanikai és termodinamikai elméleteket, melyekben a hőtágulás és képlékenyedés természetesen és realisztikusan figyelembe vehetők, már egyszerű konstitutív választások és kis deformációk esetén is. Megközelítésünkkel olyan elméletet nyerünk, mely mentes a nemfizikai segédelemektől és kísérleti tapasztalatokkal összhangban állóan tud folyamatokat leírni. Előttünk álló feladat a reológia képlékenyedéssel való csatolódásának vizsgálata, a tönkremenetel leírása, és még számos további jelenségkörre való kiterjesztés.

KÖSZÖNETNYÍLVÁNÍTÁS

Munkánkat az OTKA K81161 és K104260 pályázatai támogatták.

IRODALMI HIVATKOZÁSOK

Fülöp T. 2011. Thermal expansion, elastic stress and finite deformation kinematics. In: *10th HEEP International Conference.* Budapest University of Technology and Economics, Department of Energy Engineering, Budapest, 227-232.

Fülöp T., Ván P. 2012. Kinematic quantities of finite elastic and plastic deformation. *Math. Meth. Appl. Sci.*, 35, 1825-1841.

Lubarda V.A. 2004. On thermodynamic potentials in linear thermoelasticity. *International Journal of Solids and Structures*, 41, 7377-7398.

Matolcsi T. 1984. *A Concept of Mathematical Physics: Models for SpaceTime.* Akadémiai Kiadó, Budapest, 1-250.

Matolcsi T. 1986. *A Concept of Mathematical Physics: Models in Mechanics.* Akadémiai Kiadó Budapest, 1-250.

Matolcsi T. 1993. *Spacetime Without Reference Frames.* Akadémiai Kiadó, Budapest, 1-250.

Rusinko A., Rusinko K. 2011. *Plasticity and Creep of Metals.* Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 1-250.

Ván P., Fülöp T. 2012. Universality in heat conduction theory: weakly nonlocal thermodynamics. *Annalen der Physik*, 524, 470-478.

Ván P., Fülöp T. 2013. Classic and new rheological models in the framework of a thermodynamical internal variable theory. *In preparation.*

Verhás J. 1997. *Thermodynamics and Rheology.* Akadémiai Kiadó, Budapest, 1-250.