

# Untersuchung irreversiblen Materialverhaltens mithilfe eines auf thermodynamischen Prinzipien basierenden Ansatzes

Wolfgang H. Müller<sup>1,\*</sup> and B. Emek Abali<sup>1,\*\*</sup>

<sup>1</sup> Technische Universität Berlin, Fak. V, Institut für Mechanik, Lehrstuhl für Kontinuumsmechanik und Materialtheorie, Sekr. MS2, Einsteinufer 5, D-10587 Berlin

Bekanntlich verwendet man in der Materialwissenschaft „Prinzip“, um die mögliche Form von Materialgleichungen einzuschränken. Insbesondere sind hier das Entropieprinzip (etwa in der Version der Thermodynamik irreversibler Prozesse (TIP) nach [1], der Clausius-Duhem Formalismus nach [2] oder die Methode der Lagrange-Multiplikatoren [3]) zu nennen. Darüber hinaus existieren Extremalprinzipie, also „Derivate“ des Entropieprinzips, etwa das Prinzip der minimalen Energiedissipation nach [4] oder das Prinzip der maximalen Entropieproduktionsrate (bzw. Dissipationsrate) nach [5]. Langfristig gesehen ist es unser Ziel, die Zusammenhänge zwischen diesen auf den ersten Blick unabhängigen Postulaten aufzuzeigen. Kurzfristig geht es in diesem Artikel darum, ein konkretes Randwertproblem zu studieren, an dem sich erstens die Entropieproduktionsrate explizit berechnen und ihre Maximaleigenschaften diskutieren lassen und zweitens der Übergang zwischen nichtlinear-reibungsbehafteter Flüssigkeit zum starr-plastischen, linear verfestigenden Festkörper vornehmen lässt.

© 2010 Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim

## 1 Einführung

Ein thermodynamischer Prozess ist durch die fünf Primärfelder Massendichte  $\rho = \rho(x_i, t)$ , Bewegung (Geschwindigkeit)  $v_i = v_i(x_j, t)$  und Temperatur  $T = T(x_i, t)$  definiert. Die Bilanzgleichungen

$$\dot{\rho} + \rho \frac{\partial v_i}{\partial x_i} = 0 \quad , \quad \rho \dot{v}_i + \frac{\partial \sigma_{ji}}{\partial x_j} = \rho f_i \quad , \quad \rho \dot{u} + \rho \frac{\partial q_i}{\partial x_i} = \sigma_{ji} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \rho r \quad (1)$$

dienen dazu, diese Felder zu ermitteln, wobei sie neue Unbekannte, nämlich Spannungen  $\sigma_{ij}$ , Wärmefluss  $q_i$  und innere Energie  $u$  einbringen, welche über die Materialgleichungen mit den Primärfeldern verknüpft werden können. Im folgenden wird ein Materialmodell vorgestellt [5], welches ursprünglich für reibungsbehaftete Flüssigkeiten definiert ist, aber auch im Grenzfall den Übergang zur Plastizität erlaubt. Die Spannungen werden dabei als eine Tensorfunktion zweiter Stufe von Invarianten des Geschwindigkeitsgradienten dargestellt. Für eine ebene, stationäre Kanalströmung im kartesischen Koordinatensystem (s. Fig. 1b) wird das Geschwindigkeitsprofil  $v_i$  gesucht. Per semi-inversen Ansatz werden die primären Felder als  $\rho = \text{const.}^1$ ,  $v_i = (v_1(x_2), 0, 0)$ ,  $T = T(x_2)$  angenommen. Der Vortrieb der Strömung und das Einsetzen des Fließvorganges<sup>2</sup> wird vom Druck bzw. Druckgradienten in  $x_1$  gesteuert. Geschwindigkeitsgradienten höherer Ordnung werden vernachlässigt und die Viskosität (wegen des  $\arctan(\dots)$  Terms) ist nichtlinear:

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + 2 \left( a + \frac{k}{\pi \sqrt{d_{(2)}}} \arctan \left( \frac{1}{b} \sqrt{d_{(2)}} \right) \right) d_{ij} \quad , \quad d_{(2)} = \frac{1}{2} d_{ij} d_{ij} \quad , \quad d_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) \quad (2)$$

Diese vereinfacht sich durch den gewählten Ansatz und für den stationären Fall ohne Volumenkräfte  $f_i = 0$  folgt aus der Impulsbilanz (1)<sub>2</sub> (für  $i = 1, 2, 3$ ):

$$0 = -\frac{\partial p}{\partial x_3} \quad , \quad 0 = -\frac{\partial p}{\partial x_2} \quad , \quad 0 = -\frac{\partial p}{\partial x_1} + \frac{\partial \sigma_{21}}{\partial x_2} \quad (3)$$

Mit dem symmetrischen Anteil des Geschwindigkeitsgradienten lässt sich der Spannungs-Schergeschwindigkeitsgradientenverlauf (s. Fig. 1a) ermitteln und in Kontext mit folgender Differentialgleichung auswerten:

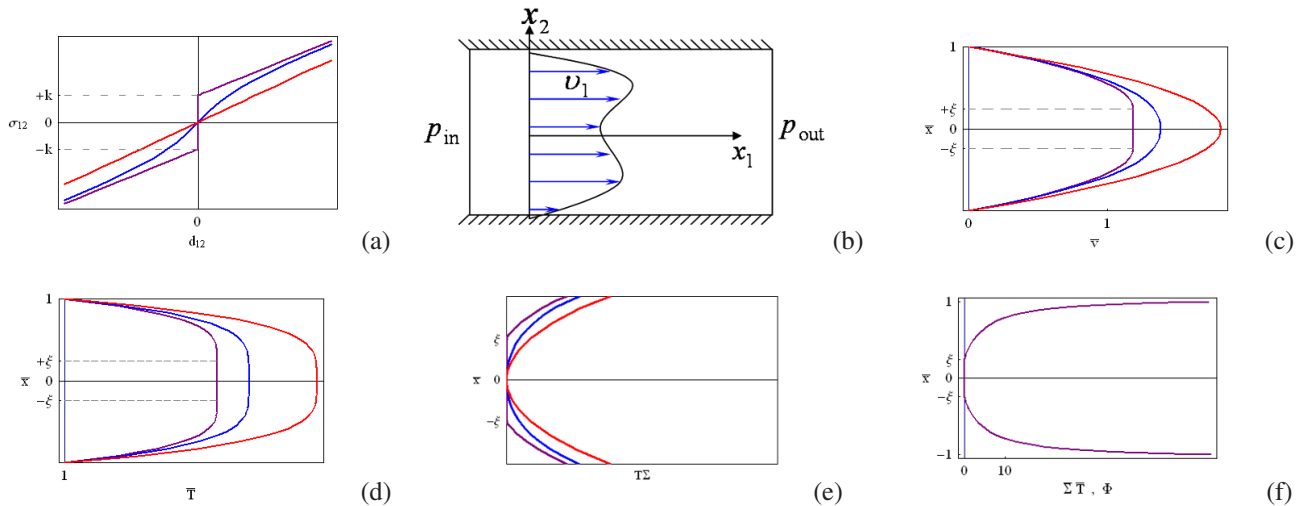
$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \left( 2ad_{12} + \frac{2k}{\pi} \arctan \left( \frac{d_{12}}{b} \right) \right) \quad , \quad |p'| + \frac{d^2 v_1}{dx_2^2} \left[ a + \frac{4kb}{\pi \left( 4b^2 + \left( \frac{dv_1}{dx_2} \right)^2 \right)} \right] = 0 \quad (4)$$

\* e-mail: wolfgang.h.mueller@tu-berlin.de, Tel: +49 (0)30 31 42 76 82, Fax: +49 (0)30 31 42 44 99

\*\* e-mail: abali@tu-berlin.de, Tel: +49 (0)30 31 42 50 25, Fax: +49 (0)30 31 42 44 99

<sup>1</sup> inkompressible Flüssigkeit

<sup>2</sup> Statt des fluidmechanischen Wortes „Strömung“ nutzen wir hier bewusst das Wort „Fließen“, wie in der Festkörpermechanik üblich.



**Fig. 1** (a) Materialmodell, (b) ebene Kanalströmung, (c) Geschwindigkeits-, (d) Temperatur- und (e,f) Dissipationspotentiallösung mit Detailausschnitt

wobei  $|p'| = \left| \frac{dp}{dx_1} \right|$  einen positiven, konstanten Druckgradienten in  $x_1$ -Richtung bedeutet. Die numerische Lösung<sup>3</sup> der Geschwindigkeit (s. Fig. 1c) zeigt den Grenzübergang von der reibungsbehafteten Flüssigkeit (Navier-Stokes, rote Kurve, mit parabelförmigen  $v_1$ -Profil) in die Plastizität (violette Kurve), mit einem starren Kern in der Mitte. Wir erkennen einen Innenbereich  $0 \leq |\bar{x}| \leq \xi$ , wo kein Fließen stattfindet, der durch den plastisch-fließenden Außenbereich mitbewegt wird (Starrkörperbewegung). Für den Grenzfall  $b = 0$  kann die Geschwindigkeit im Außenbereich  $\xi \leq |\bar{x}| \leq 1$  ebenfalls analytisch bestimmt<sup>4</sup> werden:

$$\bar{v}(\bar{x}) = \frac{1}{2\xi} (1 - \bar{x}^2) - (1 - |\bar{x}|) \quad , \quad \bar{v} = \frac{v_1}{v_0} = \frac{v_1 a}{|p'_{kr}| R^2} \quad , \quad \bar{x} = \frac{x_2}{R} \quad , \quad \xi = \frac{r_0}{R} = \frac{|p'_{kr}|}{|p'|} \quad , \quad (5)$$

wobei  $R$  die halbe Kanalhöhe bezeichnet und der eingeführte Parameter  $|p'_{kr}|$  auf den kritischen Druckgradienten hinweist, bei dem zum ersten Mal Fließen auftritt, d.h. der Spannungszustand das Fließkriterium  $\sigma_{12} = k$  erfüllt, und somit  $|p'_{kr}|$  zu einem messbaren Materialparameter macht. Durch die Energiebilanz (1)<sub>3</sub> ohne Zufuhr und mit dem Fouriersgesetz für Wärmeleitung kann der Temperaturverlauf<sup>5</sup>  $\bar{T} = \frac{T}{T_0}$  berechnet werden. Mit den Massen- und Energiebilanzen (1)<sub>1,3</sub> und der GIBBSschen Gleichung folgt nach der TIP die Entropieproduktion  $\Sigma = \Sigma(|p'_{kr}|, a, k, \kappa)$  als eine Funktion messbarer Materialparameter. Durch Umformulierung und per Einführung  $\bar{\Sigma} = \frac{\Sigma T_0 R}{k v_0}$  kann ein sog. Dissipationspotential  $\Phi = \bar{T} \bar{\Sigma}$  berechnet werden. Für den Grenzfall  $b = 0$  ergibt sich eine analytische Lösung (s. Fig. 1f) im Außenbereich  $\xi \leq |\bar{x}| \leq 1$ :

$$\bar{T} \bar{\Sigma} = \Phi = \frac{\bar{\kappa}}{\bar{T}} \left( \frac{d\bar{T}}{d\bar{x}} \right)^2 + \bar{\mu} \left( \frac{d\bar{v}}{d\bar{x}} \right)^2 + \left| \frac{d\bar{v}}{d\bar{x}} \right| \quad , \quad \bar{\kappa} = \frac{T_0 \kappa}{v_0 k R} \quad , \quad \bar{\mu} = \frac{a v_0}{k R} \quad , \quad (6)$$

welches die thermischen und mechanischen Anteile der Entropieproduktion klar herausstellt. Im gelösten stationären Fall gibt es keine Temperaturgradienten (s. thermischen Anteil) und deshalb auch keine minimale Entropieproduktion im Kernbereich  $0 \leq |\bar{x}| \leq \xi$ , wo kein plastisches Fließen auftritt. Die Entropieproduktion ist an den Rändern am größten, eben maximal, wo die Geschwindigkeitsgradienten am größten sind, d.h. eine Variation nach den Geschwindigkeiten extremal wird.

## References

- [1] C. Eckart, Phys. Rev. **73**(4), 373–382 (1948).
- [2] B. D. Coleman and W. Noll, Archive for Rational Mechanics and Analysis **13**(1), 167–178 (1963).
- [3] I. Müller, Thermodynamics (Pitman, 1985).
- [4] L. Onsager, Phys. Rev. **37**(4), 405– (1931).
- [5] H. Ziegler, An Introduction to Thermomechanics (North Holland, Amsterdam, 1977, 2<sup>nd</sup> ed. 1983).

<sup>3</sup> Diese wurde iterativ mit einem Schießverfahren bestimmt, d.h. die Lösung und ihre Gradienten an einem Rand werden abgeschätzt und damit die erhaltene Lösung am anderen Rand überprüft und korrigiert.

<sup>4</sup> unter Einführung diverser dimensionsloser Parameter  $\bar{v}$ ,  $\bar{x}$ ,  $\xi$

<sup>5</sup> hier mit gleicher Randtemperatur  $T_0$  oben und unten