非线性本构关系

在ABAQUS中的实现

阚前华　康国政　徐　祥　著

Implementations of nonlinear constitutive relations in ABAQUS

科学出版社

非线性本构关系
在 ABAQUS 中的实现

阚前华　康国政　徐　祥　著

科学出版社
北　京

内 容 简 介

本书主要针对不同类型的非线性本构关系及其有限元实现过程进行阐述，着重讨论时间相关和时间无关两类非线性本构关系、循环本构关系和热力耦合循环本构关系、大变形本构关系、晶体塑性循环本构关系和应变梯度塑性本构关系。通过对非线性本构关系的应用背景、本构方程、非线性方程迭代求解和一致性切线模量推导进行详细介绍，展示非线性本构关系在结构非线性分析中的具体应用，为研究固体材料非线性力学响应提供基本的理论体系和数值分析方法。

本书可供力学、土木、材料、机械等工科专业的研究生阅读，作为非线性本构关系有限元实现方面的参考书籍，也可以作为技术开发人员进行结构非线性分析的参考用书。

图书在版编目（CIP）数据

非线性本构关系在 ABAQUS 中的实现 / 阚前华，康国政，徐祥著. —北京：科学出版社，2019.8

ISBN 978-7-03-061815-3

Ⅰ. ①非… Ⅱ. ①阚… ②康… ③徐… Ⅲ. ①非线性弹性力学－有限元分析－应用软件 Ⅳ. ①O241.82-39

中国版本图书馆 CIP 数据核字（2019）第 137156 号

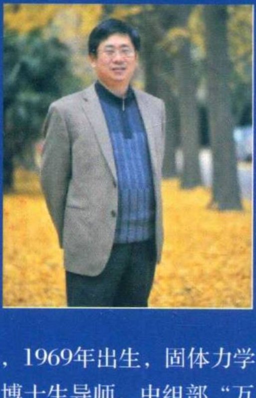
责任编辑：华宗琪 / 责任校对：杨聪敏
责任印制：罗 科 / 封面设计：墨创文化

科 学 出 版 社 出版
北京东黄城根北街 16 号
邮政编码：100717
http：//www.sciencep.com

四川煤田地质制图印刷厂印刷
科学出版社发行 各地新华书店经销
*
2019 年 8 月第 一 版 开本：787×1092 1/16
2019 年 8 月第一次印刷 印张：14
字数：330 000

定价：112.00 元

阚前华，男，1980年出生，固体力学博士，西南交通大学教授，博士生导师。任中国力学学会青年工作委员会委员，南方计算力学联络委员会副主任委员，四川省力学学会理事，四川省力学学科科普与教育工作委员会副主任委员，四川省力学学会青年工作委员会副主任委员，四川省力学学会“健康评估与寿命预测”专业委员会委员。国家级教学成果二等奖获得者，澳大利亚“Endeavour Research Fellowship”获得者，教育部自然科学二等奖获得者，四川省杰出青年基金获得者，四川省优秀博士论文获得者，入选西南交通大学“扬华计划”“竢实之星”和“唐立新优秀学者”。主要研究方向为智能材料多场耦合循环本构关系和轮轨滚动接触疲劳研究。主持/主研国家级项目10余项，企业横向课题30余项；出版中、英文专著各1部，教材5部；发表学术论文200余篇，其中，SCI论文70余篇，SCI他引1000余次。



康国政，男，1969年出生，固体力学博士，西南交通大学首席教授，博士生导师。中组部“万人计划”科技创新领军人才，教育部“长江学者”特聘教授，国家杰出青年科学基金获得者，科技部中青年科技创新领军人才，享受国务院政府特殊津贴专家，德国“洪堡学者”，四川省学术与技术带头人，教育部新世纪优秀人才，霍英东教育基金会优秀青年教师基金和四川省杰出青年学科带头人培养基金获得者，四川省有突出贡献的优秀专家，教育部力学类专业指导委员会委员。主要研究方向为先进材料的循环本构关系、疲劳和断裂，主持国家级项目8项、省部级项目10余项；获教育部自然科学二等奖1项、国家级教学成果二等奖1项；发表学术论文300余篇，其中，SCI论文200余篇，SCI他引2000余次，2014–2018年连续5年入选Elsevier中国高被引学者榜单（材料力学）；出版中、英文专著各1部，研究生教材3部；现为国际疲劳杂志（Int. J. Fatigue）共同主编。

前　言

固体力学研究固体在外力、温度和形变作用下的响应，是连续介质力学的一个重要分支，而固体材料的本构关系则是固体力学最重要的研究方向之一，是进行复杂材料非线性分析的基石。材料本构关系的合理性和准确性是真实反映固体材料服役行为和开展结构数值分析的前提。目前大部分规范采用 Hooke 定律描述弹性应力-应变关系，进而基于许用应力开展结构设计。然而，随着新型材料和结构的不断涌现，材料和结构的服役环境日趋复杂，不仅涉及传统的金属材料，还有可能利用到高分子材料、智能材料等；不仅涉及弹塑性问题，还可能涉及热力耦合问题；不仅涉及单调加载情形，还有可能涉及循环加载情形；不仅涉及宏观尺度，还有可能涉及微纳米尺度。有限元分析作为国际工业界成熟的结构分析方法已被广泛应用在生产、制造的各个环节，极大地缩短了产品的研发周期。其中，常用的 ABAQUS、ANSYS、NASTRAN、COMSOL Multiphysics 等有限元软件因其工程仿真的便利性和求解器的高效性等，受到高等院校、科研院所和工业界的普遍欢迎。它们均为用户提供了大量的标准材料库，包含了多种经典的非线性材料模型。然而，非线性本构关系因材料、服役环境、研究尺度而异，现有有限元软件中难以一一包含。因此，针对不同类型、服役环境和研究尺度，借助大型有限元软件 ABAQUS 开发非弹性本构关系的用户材料子程序，对固体材料和结构在复杂加载环境下的强度和疲劳分析具有重要的理论意义和工程应用价值。

作者于 2003 年开始从事固体材料本构关系及其有限元实现方面的研究工作，不断推行非线性本构关系在航空、核电、铁路和高速公路等方面的应用，深切感受到工业界对复杂服役环境下结构非线性分析的紧迫需求；同时，也深知非线性本构关系自身的复杂性，一个基础的开发范例将极大地加快科技工作者的研发周期，而这些基础资料却很难从公共渠道获取。作者及其合作者自 2008 年开始在研究生教学中开设了“非弹性本构关系及其有限元实现”课程，广受研究生的欢迎，大量研究生在该课程的启发下完成了硕士学位论文和博士学位论文。然而，该课程目前仅受益于西南交通大学力学、土木和机械专业的研究生。

为了更好地为从事非线性本构关系用户子程序开发的广大研究生群体和科技工作者服务，作者试图通过本书尽可能全面地介绍结构分析中最新的非线性本构关系，不仅详细地介绍了不同非线性本构关系的本构框架及其应用范围，还重点介绍了有限元实现过程，并通过单个单元和结构分析进行充分验证，旨在说明不同类型非线性本构关系有限元实现的差异和特点，为开发者提供范例和参考。更为重要的是，所有开发的用户子程序源代码和输入文件均通过二维码方式提供，极大地方便了读者阅读和学习。考虑到 ABAQUS 在非线性材料本构关系方面的突出表现和用户子程序开发的友好性，本书所有实例均在 ABAQUS 中完成，读者通过修改相关代码对应的变量可较容易地移植到其他有限元软件中。

本书共 13 章，以不同类型的非线性本构关系为例，结合团队的研究成果，详尽地介绍了各类非线性本构关系在有限元软件 ABAQUS 中的有限元实现过程。第 1 章为绪论部分，介绍本构关系的框架、用户子程序模板和输入文件格式；第 2～6 章首先介绍非线性弹性和黏弹性本构关系，进而考虑弹塑性、黏塑性和超弹性本构关系；第 7 章和第 8 章介绍循环弹塑性和黏塑性本构关系；第 9 章和第 10 章介绍热力耦合循环塑性本构关系和耦合损伤循环塑性本构关系；第 11 章则在大变形框架下介绍弹塑性循环本构关系；第 12 章和第 13 章基于微观变形机制考虑材料的晶体结构和尺寸效应分别介绍了晶体塑性循环本构关系和应变梯度塑性本构模型。

谨对本书所引用到的所有研究成果的作者表示诚挚谢意；感谢李建博士、丁立博士、赵吉中博士、王子仪博士和梁志鸿硕士在内容编写和校对方面的大力支持和帮助。最后，感谢国家自然科学基金（11572265，U1734207 和 11532010）的资助和支持。

受编者水平所限，不妥之处在所难免，敬请读者批评指正，共同提高。

阚前华　康国政　徐　祥

2018 年 8 月于成都

目　　录

第 1 章　绪论：非线性本构关系简介 ······ 1
1.1　本构关系概述 ······ 1
1.1.1　本构关系的含义 ······ 1
1.1.2　本构关系的分类 ······ 1
1.1.3　本构原理 ······ 2
1.2　本构关系的两种形式 ······ 6
1.2.1　全量型本构关系 ······ 6
1.2.2　增量型本构关系 ······ 6
1.3　本构关系的张量表示 ······ 8
1.4　非线性求解策略 ······ 11
1.4.1　直接迭代法 ······ 11
1.4.2　Newton-Raphson 迭代法 ······ 12
1.4.3　增量法 ······ 12
1.5　本构关系的有限元实现过程 ······ 13
1.5.1　有限元法简介 ······ 13
1.5.2　有限元分析的基本步骤 ······ 14
1.6　ABAQUS 用户材料子程序接口 ······ 15
1.6.1　UMAT 简介 ······ 15
1.6.2　输入文件 INP 格式 ······ 18
参考文献 ······ 21
第 2 章　非线性弹性本构关系 ······ 22
2.1　非线性弹性本构关系简介 ······ 22
2.2　本构方程 ······ 23
2.3　有限元实现格式 ······ 24
2.3.1　增量形式的本构方程 ······ 24
2.3.2　一致性切线模量推导 ······ 25
2.4　材料参数确定 ······ 27
2.5　单元验证 ······ 28
2.5.1　有限元模型 ······ 28
2.5.2　结果分析 ······ 28
2.5.3　UMAT 代码和 INP 文件 ······ 29
2.5.4　材料参数和状态变量声明 ······ 29

2.6 应用实例 ······ 30

2.6.1 问题描述 ······ 30

2.6.2 有限元模型 ······ 31

2.6.3 结果分析 ······ 32

2.6.4 INP 文件 ······ 33

参考文献 ······ 33

第 3 章 黏弹性本构模型 ······ 35

3.1 流变学基础 ······ 35

3.2 本构方程 ······ 36

3.3 有限元实现格式 ······ 38

3.3.1 增量形式的本构方程 ······ 38

3.3.2 一致性切线模量推导 ······ 38

3.3.3 比能量 ······ 39

3.4 材料参数确定 ······ 39

3.5 单元验证 ······ 40

3.5.1 有限元模型 ······ 40

3.5.2 结果分析 ······ 41

3.5.3 INP 文件模板 ······ 41

3.5.4 材料参数和状态变量声明 ······ 41

3.6 黏弹性材料的压痕分析 ······ 42

3.6.1 压痕有限元模型 ······ 42

3.6.2 结果分析 ······ 42

3.6.3 INP 输入文件 ······ 44

参考文献 ······ 44

第 4 章 弹塑性本构关系 ······ 45

4.1 弹塑性本构关系简介 ······ 45

4.1.1 基本概念介绍 ······ 45

4.1.2 屈服准则 ······ 49

4.2 本构方程 ······ 54

4.2.1 各向同性硬化 ······ 54

4.2.2 随动硬化 ······ 57

4.2.3 混合硬化 ······ 62

4.3 有限元实现格式 ······ 63

4.3.1 增量形式的本构方程 ······ 64

4.3.2 一致性切线模量推导 ······ 68

4.4 材料参数确定 ······ 70

4.5 单元验证 ······ 71

4.5.1 有限元模型 ······ 71

4.5.2 结果分析……71
4.5.3 INP 文件模板……72
4.5.4 材料参数和状态变量声明……72
4.6 应用实例……73
4.6.1 问题描述……73
4.6.2 有限元模型……73
4.6.3 结果分析……74
4.6.4 INP 文件……75
参考文献……75
第 5 章 黏塑性本构关系……76
5.1 黏塑性本构关系简介……76
5.2 本构方程……76
5.3 有限元实现格式……78
5.3.1 增量形式的本构方程……79
5.3.2 一致性切线模量推导……81
5.4 材料参数确定……83
5.5 单元验证……84
5.5.1 有限元模型……84
5.5.2 结果分析……84
5.5.3 INP 文件模板……84
5.5.4 材料参数和状态变量声明……84
5.6 应用实例……85
5.6.1 问题描述……85
5.6.2 有限元模型……85
5.6.3 结果分析……86
5.6.4 INP 文件模板……87
参考文献……87
第 6 章 超弹性本构关系……88
6.1 超弹性本构关系简介……88
6.2 本构方程……89
6.2.1 弹性本构方程……89
6.2.2 相变应变演化律……90
6.3 有限元实现格式……91
6.3.1 增量形式的本构方程……91
6.3.2 一致性切线模量推导……93
6.4 材料参数确定……93
6.5 单元验证……94
6.5.1 有限元模型……94

6.5.2　结果分析……94
6.5.3　UMAT 代码和 INP 文件……95
6.5.4　材料参数和状态变量声明……95
6.6　应用实例……96
6.6.1　问题描述……96
6.6.2　有限元模型……96
6.6.3　结果分析……97
6.6.4　INP 文件……98
参考文献……98
第 7 章　循环弹塑性本构关系……99
7.1　本构方程……99
7.1.1　应变分解……99
7.1.2　屈服函数……99
7.1.3　流动准则……99
7.1.4　硬化准则……100
7.2　有限元实现格式……100
7.2.1　本构方程离散……100
7.2.2　塑性乘子推导……100
7.2.3　一致性切线刚度模量推导……102
7.3　材料参数确定……103
7.4　单元验证……104
7.4.1　有限元模型……104
7.4.2　结果分析……104
7.4.3　UMAT 代码和 INP 文件……105
7.4.4　材料参数和状态变量声明……105
7.5　薄壁圆管多轴循环变形有限元分析……106
7.5.1　有限元模型……106
7.5.2　结果分析……107
7.5.3　INP 文件……109
参考文献……110
第 8 章　循环黏塑性本构关系……111
8.1　循环黏塑性本构关系简介……111
8.2　有限元实现格式……112
8.2.1　本构方程离散……112
8.2.2　隐式应力积分方法……113
8.2.3　一致性切线模量推导……115
8.3　材料参数确定……117
8.4　单元验证……118

8.4.1 验证结果 …… 118
8.4.2 UMAT 程序和 INP 文件 …… 120
8.4.3 材料参数和状态变量声明 …… 120
8.5 缺口圆棒循环黏塑性变形预测 …… 121
8.5.1 有限元模型 …… 121
8.5.2 模拟结果 …… 121
8.5.3 INP 文件 …… 123
参考文献 …… 123
第 9 章 热力耦合循环塑性本构关系 …… 124
9.1 热力耦合循环塑性模型 …… 124
9.1.1 本构方程 …… 124
9.1.2 热平衡方程 …… 126
9.1.3 温度相关演化方程 …… 127
9.2 有限元实现格式 …… 127
9.2.1 增量形式的本构方程 …… 127
9.2.2 隐式应力积分 …… 128
9.2.3 加速算法 …… 130
9.2.4 一致性切线模量推导 …… 130
9.3 材料参数 …… 131
9.4 模型验证 …… 131
9.4.1 热致颈缩行为模拟 …… 131
9.4.2 UMAT 代码和 INP 文件 …… 134
9.4.3 材料参数和状态变量声明 …… 134
9.5 位移控制循环变形行为模拟 …… 135
9.5.1 有限元分析 …… 135
9.5.2 INP 文件 …… 136
参考文献 …… 136
第 10 章 耦合损伤循环塑性本构关系 …… 138
10.1 本构方程 …… 138
10.1.1 主控方程 …… 138
10.1.2 随动硬化律 …… 139
10.1.3 损伤演化律 …… 140
10.2 有限元实现格式 …… 140
10.2.1 增量形式的本构方程 …… 140
10.2.2 一致性切线模量推导 …… 142
10.3 材料参数确定 …… 143
10.3.1 本构模型参数 …… 143
10.3.2 损伤演化参数 …… 144

10.4　单元验证 …… 145
10.4.1　有限元模型 …… 145
10.4.2　结果分析 …… 146
10.4.3　UMAT 代码和 INP 文件 …… 147
10.4.4　材料参数和状态变量声明 …… 147
10.5　轮轨二维滚动接触损伤有限元分析 …… 148
10.5.1　模型简化 …… 148
10.5.2　有限元模型 …… 149
10.5.3　结果分析 …… 153
10.5.4　INP 文件 …… 155
参考文献 …… 155
第 11 章　大变形弹塑性循环本构关系 …… 156
11.1　本构方程 …… 156
11.1.1　运动学关系 …… 156
11.1.2　对数应力率 …… 156
11.1.3　主控方程 …… 158
11.1.4　演化方程 …… 159
11.2　有限元实现格式 …… 159
11.2.1　本构方程离散 …… 159
11.2.2　隐式应力积分 …… 161
11.2.3　一致性切线模量 …… 163
11.3　模型验证 …… 164
11.3.1　有限元模型 …… 164
11.3.2　材料参数 …… 165
11.3.3　单轴拉伸真应力应变曲线模拟 …… 166
11.4　循环应力应变曲线模拟 …… 167
11.4.1　有限元模型 …… 167
11.4.2　模拟结果 …… 167
11.4.3　UMAT 代码和 INP 文件 …… 168
参考文献 …… 168
第 12 章　晶体塑性循环本构关系 …… 169
12.1　晶体学相关概念 …… 169
12.1.1　晶体取向 …… 170
12.1.2　晶面指数和晶向指数 …… 171
12.1.3　滑移系 …… 171
12.1.4　单晶体的滑移定律 …… 172
12.2　面心立方多晶循环塑性本构模型 …… 173
12.2.1　晶体塑性单晶循环塑性本构模型 …… 173

12.2.2　尺度过渡准则 ······ 176
12.3　本构模型的有限元实现 ······ 177
12.3.1　简化晶体塑性本构模型 ······ 177
12.3.2　本构模型的有限元离散 ······ 178
12.3.3　ABAQUS 用户材料子程序 UMAT ······ 183
12.3.4　UMAT 材料参数和状态变量声明 ······ 183
12.4　轧制 5083H111 铝合金板材的有限元模型 ······ 185
12.4.1　二维 Voronoï 模型 ······ 185
12.4.2　晶粒取向效应的引入 ······ 186
12.4.3　单元选择 ······ 187
12.4.4　边界条件 ······ 187
12.4.5　材料参数确定 ······ 188
12.4.6　有限元网格 ······ 188
12.4.7　模拟结果与讨论 ······ 189
12.4.8　UMAT 代码和 INP 文件 ······ 191
参考文献 ······ 192
第 13 章　应变梯度塑性本构模型 ······ 193
13.1　基于细观机制的 MSG 本构理论 ······ 194
13.1.1　Taylor 位错密度和实验规律 ······ 194
13.1.2　理论动机 ······ 194
13.1.3　基本假设 ······ 195
13.1.4　本构方程 ······ 196
13.2　有限元实现格式 ······ 197
13.2.1　UEL 子程序介绍 ······ 198
13.2.2　UEL 关键变量定义 ······ 198
13.2.3　UEL 调用 ······ 200
13.2.4　UEL 实现 ······ 201
13.2.5　材料参数声明 ······ 202
13.3　MSG 理论有限元应用 ······ 202
13.3.1　微柱拉伸有限元模拟验证 ······ 202
13.3.2　纳米压痕有限元模型 ······ 207
13.3.3　UEL 代码和 INP 文件 ······ 209
参考文献 ······ 210

第 1 章　绪论：非线性本构关系简介

1.1　本构关系概述

1.1.1　本构关系的含义

从广义上讲，本构关系是指材料激励和内部响应之间的关系，描述这一关系的数学表达式则称为本构方程。例如，电压与在电压的作用下导体产生的电流之间的关系；温差与由温差在导热物体中引起的热流之间的关系；力和可变形物体在力的作用下产生的变形之间的关系；水力梯度和由此引起的土体材料渗流之间的关系等[1]。

在连续介质力学框架下，材料的本构方程是通过另一个物理场量 $\boldsymbol{\Lambda}$（或一系列物理场）的值给出一个物理场 $\hat{\boldsymbol{\Phi}}$ 逐点的值，通常用如下形式的方程表示[2]：

$$\boldsymbol{\Phi}(\boldsymbol{X},t)=\hat{\boldsymbol{\Phi}}(\boldsymbol{\Lambda}(\boldsymbol{X},t),\boldsymbol{X}) \tag{1-1}$$

其中，函数 $\hat{\boldsymbol{\Phi}}$ 为本构响应函数。为了反映本构响应与材料点位置的相关性，将本构响应函数 $\hat{\boldsymbol{\Phi}}$ 显式地表示为材料点 $\boldsymbol{X}$ 的函数。如果物体的本构响应函数 $\hat{\boldsymbol{\Phi}}$ 与材料点 $\boldsymbol{X}$ 无关，则称物体是均匀的。

从狭义上讲，材料的本构关系反映了材料在物理运动过程中受到的外部激励和内部响应之间的关系，在固体力学范畴内讨论的材料本构关系是专指力与固体材料在力作用下产生的变形之间的关系，也称为材料的本构理论。简而言之，是讨论固体材料中的应力和应变之间的关系。最简单的本构关系就是材料力学中所涉及的胡克定律，又称为线弹性材料本构关系。

1.1.2　本构关系的分类

按照本构理论描述的材料变形行为的特性来分，大致可分为：弹性本构模型、黏弹性本构模型、塑性本构模型、黏塑性本构模型和损伤本构模型等[1]。

弹性本构模型：建立在弹性理论基础上的本构模型。包括线性弹性本构模型（即广义胡克定律）和非线性弹性本构模型。其描述的是可恢复的变形，即弹性变形与外加应力之间的关系。

黏弹性本构模型：描述与时间相关的弹性变形行为的本构模型，即反映了可恢复变形与外加应力及时间之间的关系。

塑性本构模型：建立在塑性理论基础上的一种与时间无关的本构模型，包括屈服面、流动准则及硬化准则等，描述的是不可恢复变形，即塑性变形与外加应力之间的关系。进

一步细分，可分为理想塑性本构模型（不考虑材料弹性变形）和硬化塑性本构模型（即通常提到的弹塑性模型）两大类。

黏塑性本构模型：建立在黏塑性理论基础上的一种与时间相关的本构模型，反映了塑性和黏性之间的共同作用，可分为刚性-黏塑性本构模型和弹-黏塑性本构模型（也称黏塑性本构模型）。此外，针对塑性和黏性之间的共同作用，也可将其分为分离型黏塑性本构模型和统一型黏塑性本构模型。其中，分离型黏塑性本构模型将塑性变形和黏性变形分离开来，分别引入不同的流动准则；而统一型黏塑性本构模型则不区分塑性和黏性变形，用一个统一的流动准则来反映与时间相关的塑性变形的演化。

损伤本构模型：是建立在损伤力学基础上的本构模型，其考虑各种损伤理论下损伤与变形的耦合作用。

1.1.3 本构原理

材料本构方程的建立，或者说建立的本构方程能否真实地反映材料的响应特性，必须满足如下两个基本原理（也称为本构原理）[2]。

1. 构架无差异原理（客观性原理）

由于材料的本构方程代表了不同材料点在外部作用下的响应特征，而这种特征并不会随着观察者角度的变化而变化，也就是说，建立的本构方程必须满足构架无差异性要求，即建立的本构方程在构架发生变化过程中必须是构架无差异的、客观的，其具体表示如下。

在时空变换 $\{\boldsymbol{x},t\}$ 和 $\{\boldsymbol{x}^*,t^*\}$ 中，存在：

$$\boldsymbol{x}^* = \boldsymbol{Q}(t)\boldsymbol{x} + \boldsymbol{c}(t), \quad t^* = t + a \tag{1-2}$$

其中，$\boldsymbol{Q}(t)$ 和 $\boldsymbol{c}(t)$ 分别表示正交张量和向量；a 为某一常数。实际上，$\boldsymbol{Q}(t)$ 为刚体转动；$\boldsymbol{c}(t)$ 为刚体平移。

在满足式（1-2）的两个做相对运动的时空参考系下，若标量场 ρ，向量场 $\boldsymbol{u}$，张量场 $\boldsymbol{T}$ 分别满足：

$$\rho^* = \rho, \quad \boldsymbol{u}^* = \boldsymbol{Q}\boldsymbol{u}, \quad \boldsymbol{T}^* = \boldsymbol{Q}\boldsymbol{T}\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}} \tag{1-3}$$

则分别称标量场 ρ，向量场 $\boldsymbol{u}$，张量场 $\boldsymbol{T}$ 是客观的。

2. 热力学相容性要求

热力学相容性的要求是：建立的本构方程必须满足热力学定律，即具有热力学相容性。包括热力学第一定律（能量守恒定律）和热力学第二定律（熵增原理）。

1）热力学第一定律

对于一个封闭的系统，所有外部作用对系统所做的总功率必须等于系统总能量的增加率。系统的能量众多，但对于材料在外力作用下的变形来说，只关心机械能和热能，因此对以 $\partial\Omega$ 为边界，体积为 Ω 的物体，设

（1）E 为内能，e 为比内能，则有 $E = \int_{\Omega} \rho e \mathrm{d}\Omega$。

（2）K 为动能，则 $K=\frac{1}{2}\int_{\Omega}\rho\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{v}\mathrm{d}\Omega$ 。

（3）Q 为体积 Ω 的物体的热能吸收率，可以由内部热源产生，也可以由外界通过热传递产生，即 $Q=\int_{\Omega}\rho r\mathrm{d}\Omega-\int_{\partial\Omega}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{n}\mathrm{d}s$ ，其中，r 为内热的质量密度；$\boldsymbol{q}$ 是热流矢量；$\boldsymbol{n}$ 是物体边界的外法线方向。

（4）$P_{(e)}$ 是外力的实际功率，即 $P_{(e)}=\int_{\Omega}\rho\boldsymbol{f}\cdot\boldsymbol{v}\mathrm{d}\Omega+\int_{\partial\Omega}\boldsymbol{T}\cdot\boldsymbol{v}\mathrm{d}s$。

根据质量守恒定律，物体在受外力作用而产生运动的过程中，不发生物体质量的损失或者增加，即在运动过程中物体的质量保持不变，称为质量守恒定律，其数学表达式为

$$\dot{\rho}+\rho\nabla_x\cdot\boldsymbol{v}=0 \tag{1-4}$$

其中，ρ 是物体当前时刻的密度；$\boldsymbol{v}$ 为物体当前时刻的速度矢量；∇_x 为梯度算子。

根据动量守恒定律，物体中所有点的总动量的变化率等于作用在该物体上的所有外力的矢量和，则有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{\Omega}\rho\boldsymbol{v}\mathrm{d}\Omega=\int_{\Omega}\rho\boldsymbol{f}\mathrm{d}\Omega+\int_{\partial\Omega}\boldsymbol{T}\mathrm{d}s \tag{1-5}$$

其中，$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}$ 表示物质导数；Ω 为物体当前时刻的体积；$\partial\Omega$ 为物体边界；$\boldsymbol{f}$ 为单位质量上物体所受的体力向量；$\boldsymbol{T}$ 为作用在物体边界上的张力向量，且有

$$\boldsymbol{T}=\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n} \tag{1-6}$$

$\boldsymbol{\sigma}$ 为物体的应力张量；$\boldsymbol{n}$ 是边界面的外法线方向向量。

利用散度定理：$\int_{\partial\Omega}\boldsymbol{T}\mathrm{d}s=\int_{\partial\Omega}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}\mathrm{d}s=\int_{\Omega}\nabla_x\cdot\boldsymbol{\sigma}\mathrm{d}\Omega$ ，则式（1-5）可写为

$$\int_{\Omega}\nabla_x\cdot\boldsymbol{\sigma}+\rho\boldsymbol{f}-\rho\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}\mathrm{d}\Omega=0 \tag{1-7}$$

由此可得

$$\nabla_x\cdot\boldsymbol{\sigma}+\rho\boldsymbol{f}=\rho\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t} \tag{1-8}$$

根据动量矩守恒定律，物体中所有点的总动量矩的变化率等于作用在该物体上所有矩的矢量和，则有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{\Omega}(\boldsymbol{r}\times\rho\boldsymbol{v})\mathrm{d}\Omega=\int_{\Omega}(\boldsymbol{r}\times\rho\boldsymbol{f})\mathrm{d}\Omega+\int_{\partial\Omega}(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{T})\mathrm{d}s \tag{1-9}$$

其中，$\boldsymbol{r}$ 是所考虑物体点的位置向量。利用如下积分定理：

$$\int_{\partial\Omega}(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{T})\mathrm{d}s=\int_{\partial\Omega}(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n})\mathrm{d}s=\int_{\partial\Omega}\boldsymbol{n}\cdot(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}}\mathrm{d}s=\int_{\Omega}\nabla_x\cdot(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}}\mathrm{d}\Omega \tag{1-10}$$

可得

$$\boldsymbol{\sigma}=\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{T}} \tag{1-11}$$

这就是应力张量的对称性。

基于以上定理，可得热力学第一定律：$\forall\Omega$ ，有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(E+K)=P_{(e)}+Q \tag{1-12}$$

或

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{\Omega}\rho\left(e+\frac{1}{2}\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{v}\right)\mathrm{d}\Omega=\int_{\Omega}\rho(\boldsymbol{f}\cdot\boldsymbol{v}+\boldsymbol{r})\mathrm{d}\Omega+\int_{\partial\Omega}\boldsymbol{T}\cdot\boldsymbol{v}-\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{n}\mathrm{d}s \tag{1-13}$$

利用散度定理，有

$$\int_{\partial\Omega}\boldsymbol{T}\cdot\boldsymbol{v}-\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{n}\mathrm{d}s=\int_{\partial\Omega}[(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n})\cdot\boldsymbol{v}-\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{n}]\mathrm{d}s=\int_{\Omega}\nabla_x(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{v}-\boldsymbol{q})\mathrm{d}\Omega \tag{1-14}$$

利用式（1-5）和式（1-6）可得

$$\int_{\Omega}\rho\frac{\mathrm{d}e}{\mathrm{d}t}\mathrm{d}\Omega=\int_{\Omega}\rho(\boldsymbol{f}\cdot\boldsymbol{v}+\boldsymbol{r})+\nabla_x(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{v}-\boldsymbol{q})\mathrm{d}\Omega \tag{1-15}$$

再利用动量守恒定律有

$$\rho\frac{\mathrm{d}e}{\mathrm{d}t}=\boldsymbol{\sigma}:\boldsymbol{D}+\nabla_x\cdot\boldsymbol{q} \tag{1-16}$$

写成分量形式为

$$\rho\frac{\mathrm{d}e}{\mathrm{d}t}=\sigma_{ij}D_{ij}+\rho r-q_{ii} \tag{1-17}$$

其中，$\boldsymbol{D}$ 为变形率张量。在小变形假设下，式（1-17）可写成

$$\rho\frac{\mathrm{d}e}{\mathrm{d}t}=\sigma_{ij}\dot{\varepsilon}_{ij}+\rho r-q_{ii} \tag{1-18}$$

其中，$\dot{\varepsilon}_{ij}$ 为应变率张量。

2）热力学第二定律

在一个物体体系中存在一个热力学状态变量——熵，其表达式为 $S=\int_{\Omega}\rho s\mathrm{d}\Omega$，熵的变化决定了系统中能量转移的方向。熵反映的是一种与温度变化相关的能量变化。热力学第二定律指出，熵的生成率总是大于或等于热吸收率除以温度，对 $\forall\Omega$ 有

$$\frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}t}\geqslant\int_{\Omega}\frac{\rho r}{T}\mathrm{d}\Omega-\int_{\partial\Omega}\frac{\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{n}}{T}\mathrm{d}s \tag{1-19}$$

其中，S 为熵；s 为比熵密度。也可以由散度定理写成

$$\int_{\Omega}\left(\rho\frac{\mathrm{d}s}{\mathrm{d}t}+\nabla_x\cdot\frac{\boldsymbol{q}}{T}-\frac{\rho r}{T}\right)\mathrm{d}\Omega\geqslant 0 \tag{1-20}$$

由于对 $\forall\Omega$ 都成立，则由上式可得

$$\rho\frac{\mathrm{d}s}{\mathrm{d}t}+\nabla_x\cdot\frac{\boldsymbol{q}}{T}-\frac{\rho r}{T}\geqslant 0 \tag{1-21}$$

利用能量守恒定律，消去 ρr 可得

$$\rho\frac{\mathrm{d}s}{\mathrm{d}t}+\nabla_x\cdot\frac{\boldsymbol{q}}{T}-\frac{1}{T}\left(\rho\frac{\mathrm{d}e}{\mathrm{d}t}-\boldsymbol{\sigma}:\boldsymbol{D}+\nabla_x\cdot\boldsymbol{q}\right)\geqslant 0 \tag{1-22}$$

由于 $\nabla_x\cdot\frac{\boldsymbol{q}}{T}=\frac{\nabla_x\cdot\boldsymbol{q}}{T}-\frac{\boldsymbol{q}\cdot\mathrm{grad}(T)}{T^2}$，再乘以 $T\,(T>0)$，可得

$$\rho\left(T\frac{\mathrm{d}s}{\mathrm{d}t}-\frac{\mathrm{d}e}{\mathrm{d}t}\right)+\boldsymbol{\sigma}:\boldsymbol{D}-\frac{\boldsymbol{q}\cdot\mathrm{grad}(T)}{T^2}\geqslant 0 \tag{1-23}$$