

УДК 539.3

О РАСЧЕТЕ ЭФФЕКТИВНЫХ УПРУГИХ ХАРАКТЕРИСТИК
НЕОДНОРОДНЫХ, МАКРОСКОПИЧЕСКИ АНИЗОТРОПНЫХ
МАТЕРИАЛОВ

КОРНЕЕВ В. И., КУЗЬМЕНКО Ю. В., ШЕРМЕРГОР Т. Д.

Среди методов расчета эффективных упругих характеристик неоднородных материалов следует отметить сингулярное приближение теории случайных функций [1], вариационный метод [2], метод самосогласования [3] и гипотезу сильной изотропии [4]. Можно показать, что все они приводят к эквивалентным расчетным формулам [5]. Теория расчета эффективных упругих характеристик хорошо развита для макроскопически изотропных неоднородных материалов, в то время как при расчете макроскопически анизотропных материалов обычно ограничиваются приближением однородных деформаций и однородных напряжений. Используется также метод самосогласования [6, 7] и корреляционное приближение [8]. Заметим, что последний метод в том виде, в котором он использовался, позволяет учитывать только текстуру формы но не ориентационную текстуру, т. е. преимущественную ориентацию кристаллографических осей кристаллитов.

В публикуемой работе предложено обобщение методов расчета, развитых для макроскопически изотропных материалов на анизотропный случай. Находится сингулярная часть вторых производных тензора Грина уравнения равновесия анизотропной среды.

1. Формальное решение. Рассмотрим неоднородный, макроскопически анизотропный материал, тензор модулей упругости которого c_{ijkl} является случайной функцией координат, и однородный материал (тело сравнения), имеющий те же размеры и форму, с тензором модулей упругости c_{ijkl}^c . Отметим, что макроскопическая симметрия неоднородного тела совпадает с симметрией тела сравнения. Общее решение задачи о нахождении эффективных упругих характеристик неоднородных материалов в сингулярном приближении дается формулой [1, 5]:

$$c^* = \langle c(I - gc')^{-1} \rangle \langle (I - gc')^{-1} \rangle^{-1}, \quad c' \equiv c - c^c \quad (1.1)$$

Здесь I — единичный тензор четвертого ранга; степень (-1) обозначает операцию обращения, а угловые скобки — усреднения; тензор g определяется равенством

$$g_{ijkl} = \int_V G_n^{(s)}(i,j)(l) dV \quad (1.2)$$

где $G^{(s)}$ — сингулярная часть вторых производных тензора Грина уравнения равновесия для тела сравнения; круглыми скобками у индексов обозначена операция симметризации, а запятой — операция дифференцирования по соответствующей координате.

Отметим, что в публикуемой работе тело сравнения анизотропно. Как известно, тензор Грина для анизотропной среды аналитически получить не удается [9]. Однако тензор g можно получить в квадратурах.

2. Нахождение тензора g . Уравнение равновесия для тела сравнения имеет вид $L_{ik}^c u_k = -f_i$, $L_{ik}^c \equiv \nabla_p c_{iplk}^c \nabla_l$. Используя интегральное преобразование Фурье, запишем образ второй производной тензора Грина в виде

$G_{ij,mn}(\mathbf{k}) = -k_m k_n A_{ij}^{-1} / k^2$, $A_{ij} = c_{ijkl}^c k_p k_l / k^2$, где A_{ij}^{-1} — элементы матрицы, обратной A . Тогда исходя из определения сингулярной части второй производной тензора Грина (1.2) и используя обратное преобразование Фурье, имеем $g_{ijkl} = \left(\iint G_{h(i,j)l}(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} dV d\mathbf{k} \right) / 8\pi^3$, где в случае ориентационной текстуры интегрирование в \mathbf{r} -пространстве производится по сферическому объему. Интегрируя по \mathbf{r} и модулю вектора \mathbf{k} , получаем

$$g_{ijkl} = -\frac{1}{4\pi} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \Lambda_{h(ij)l}^{-1} n_j n_l \sin \theta d\theta d\varphi \quad (2.1)$$

$$\Lambda_{ij} = c_{imjn}^c n_m n_n, \quad n_1 = \sin \theta \cos \varphi, \quad n_2 = \sin \theta \sin \varphi, \quad n_3 = \cos \varphi$$

В случае орторомбической симметрии тела сравнения элементы тензора Λ_{ij} принимают вид

$$\Lambda_{11} = \lambda + 1/2(1-4n_1^2)(c_{55}^c + c_{66}^c - c_{44}^c) + n_1^2(c_{11}^c - c_{12}^c - c_{13}^c + c_{23}^c)$$

$$\Lambda_{22} = \lambda + 1/2(1-4n_2^2)(c_{44}^c + c_{66}^c - c_{55}^c) + n_2^2(c_{22}^c - c_{12}^c - c_{23}^c + c_{13}^c)$$

$$\Lambda_{33} = \lambda + 1/2(1-4n_3^2)(c_{44}^c + c_{55}^c - c_{66}^c) + n_3^2(c_{33}^c - c_{13}^c - c_{23}^c + c_{12}^c)$$

$$\Lambda_{12} = \Lambda_{21} = n_1 n_2 (c_{12}^c + c_{66}^c), \quad \Lambda_{13} = \Lambda_{31} = n_1 n_3 (c_{13}^c + c_{55}^c), \quad \Lambda_{23} = \Lambda_{32} = n_2 n_3 (c_{23}^c + c_{44}^c)$$

$$\lambda = 1/2(c_{44}^c + c_{55}^c + c_{66}^c) - n_1^2 c_{44}^c - n_2^2 c_{55}^c - n_3^2 c_{66}^c$$

В случае аксиальной текстуры материала удастся провести интегрирование по углу φ в выражении (2.1). Тогда для ненулевых компонент тензора \mathbf{g} имеем

$$g_{11} = g_{22} = 1/2(I_1 - I_2) + 3/8R, \quad g_{12} = g_{21} = 1/2R$$

$$g_{13} = g_{31} = g_{23} = g_{32} = 1/2(c_{13}^c + c_{44}^c)(I_4 - I_5)$$

$$g_{33} = (c_{11}^c - c_{44}^c)I_5 - c_{11}^c I_4, \quad g_{66} = 2(g_{11} - g_{12})$$

$$g_{44} = g_{55} = I_2 + 1/2[c_{11}^c I_3 - (2c_{11}^c + 2c_{13}^c + c_{44}^c)I_4 - (c_{11}^c - 2c_{13}^c + c_{44}^c)I_5 - b_1 I_7 + (b_1 - b_2)I_8 + b_2 I_9]$$

$$R = b_1 I_6 + (b_2 - 2b_1)I_7 + (b_1 - 2b_2)I_8 + b_2 I_9$$

$$b_1 = b_3 c_{44}^c, \quad b_2 = b_3 (c_{33}^c - 2c_{13}^c - 3c_{44}^c + b_3) - (c_{13}^c + c_{44}^c - b_3)^2$$

$$b_3 = 1/2(c_{11}^c + c_{12}^c)$$

$$I_1 = \int_0^1 \frac{dx}{P}, \quad I_2 = \int_0^1 \frac{x^2 dx}{P}, \quad I_3 = \int_0^1 \frac{dx}{D}, \quad I_4 = \int_0^1 \frac{x^2 dx}{D}, \quad I_5 = \int_0^1 \frac{x^4 dx}{D}$$

$$I_6 = \int_0^1 \frac{dx}{DP}, \quad I_7 = \int_0^1 \frac{x^2 dx}{DP}, \quad I_8 = \int_0^1 \frac{x^4 dx}{DP}, \quad I_9 = \int_0^1 \frac{x^6 dx}{DP}$$

$$P = 1/2(c_{11}^c - c_{12}^c) + [c_{44}^c - 1/2(c_{11}^c - c_{12}^c)]x^2$$

$$D = a_1 + a_2 x^2 + a_3 x^4, \quad a_1 = -c_{11}^c c_{44}^c, \quad a_2 = h - a_1, \quad a_3 = -h - c_{33}^c c_{44}^c$$

$$h = c_{13}^c (c_{13}^c + 2c_{44}^c) - c_{11}^c (c_{33}^c - c_{44}^c)$$

Интегралы I_1, \dots, I_9 вычисляются численно.

3. Определение c^c . Уравнениями (1.1) и (2.1) полностью определяется решение задачи о нахождении эффективных упругих характеристик неоднородных материалов в сингулярном приближении. Однако неопределенным остается тензор модулей упругости тела сравнения. Рассмотрим некоторые возможные пути определения c^c .

Из (1.1) видно, что полагаая все компоненты тензора c^c равными нулю приходим к вычислению упругих постоянных в приближении однородных

напряжений, а при $c^c \rightarrow \infty$ — в приближении однородных деформаций. Будем называть эти предельные значения энергетическими границами и обозначать соответственно c_0 и c_∞ . В [10–13] эти границы были получены для некоторых текстур, причем ширина «вилки» значительна.

Можно показать, что, формально полагая $c^c = c^*$ в формуле (1.1), сингулярное приближение сводится к приближению самосогласования. Для изотропного случая это показано в [14], обобщение на анизотропный случай очевидно. Для вычисления эффективных упругих постоянных в приближении самосогласования будем использовать следующий алгоритм. Выбирая некоторое начальное приближение для c^c , по формуле (2.1) определим тензор g , затем подставляя его в (1.1) и проводя соответствующие обращения и усреднения, получаем приближенное значение c^* . Полагая c^c равным вновь полученному c^* , находим следующее приближение для c^* . Эту процедуру будем продолжать до тех пор, пока c^* , полученные на N -м и $(N+1)$ -м шаге, не будут совпадать с заданной точностью. Как показал опыт расчетов, в качестве начального приближения удобно выбрать среднее арифметическое от c_0 и c_∞ .

Вариационные принципы, предложенные в [15], можно обобщить на случай анизотропного тела сравнения [5]. Использование этих принципов позволяет получить границы, значительно более узкие, чем энергетические.

Вариационные принципы определяют области допустимых значений постоянных упругости тела сравнения. Эта область описывается неравенствами

$$c - c^c > 0 \quad (\text{для нижней границы}); \quad c - c^c < 0 \quad (\text{для верхней границы}) \quad (3.1)$$

Выражения (3.1) следует понимать в смысле положительной (отрицательной) определенности соответствующих квадратичных форм. Определение границ с помощью вариационных принципов заключается в отыскании экстремумов c^* , определенных формулой (1.1), в областях, заданных неравенствами (3.1). В случае макроскопически анизотропного материала размерность пространства, в котором ищется экстремум c^* , равна числу независимых компонент тензора c^c .

Следует отметить, что в анизотропном случае границы следует понимать как неравенства для соответствующих квадратичных форм, а не как ограничения, накладываемые на отдельные компоненты тензоров.

4. Аксиальная текстура. В качестве примера приведем расчет эффективных упругих характеристик аксиальной текстуры. Усреднение в формуле (1.1) имеет вид

$$\langle F \rangle = \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} f(\theta, \varphi, \psi) F(\theta, \varphi, \psi) \sin \theta \, d\theta \, d\varphi \, d\psi / 8\pi^2$$

где F — некоторая усредняемая функция, f — текстурная функция, θ, φ, ψ — углы Эйлера. Механизм образования текстур и методика определения текстурной функции описаны в [16].

Для выяснения влияния разориентации осей кристаллитов на эффективные упругие характеристики будем использовать следующие модельные представления. Термодинамическую силу, приводящую к появлению выделенной ориентации, охарактеризуем потенциалом U_1 , а силу, приводящую к разбросу, — потенциалом U_2 . Тогда из общих принципов статистической физики текстурную функцию можно записать в виде

$$f(\theta) = f_0 \exp\left(\frac{\cos \theta}{\alpha}\right), \quad \alpha = \frac{U_2}{U_1}, \quad \int_0^1 f_0 e^{-\xi/\alpha} d\xi = 1$$

Преобразуем выражение (1.1) к виду

$$c^* = \langle s \rangle^{-1} + c^c + g^{-1}, \quad s \equiv (c' - g^{-1})^{-1} \quad (4.1)$$

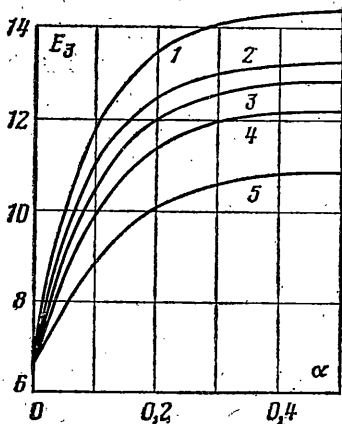
Непосредственным усреднением получаем, что c^* , c^c и g в (4.1) характеризуются аксиальной симметрией. Запишем ненулевые компоненты тензора $\langle s \rangle$ в случае орторомбической симметрии кристаллитов

$$\begin{aligned} \langle s_{11} \rangle &= \langle s_{22} \rangle = \frac{9}{64}(l_1 + l_2) + \frac{1}{2}(m_1 + m_2) + n_1 + n_2 + \\ &+ \langle \cos^2 \theta \rangle \left[\frac{3}{32}(l_1 + l_2) + \frac{1}{2}(m_1 + m_2) + n_1 + n_2 \right] + \\ &+ \frac{9}{64} \langle \cos^4 \theta \rangle (l_1 + l_2) + \langle \sin^2 \theta \rangle (m_3 + 2n_3) + \frac{3}{8} \langle \sin^4 \theta \rangle l_3 \\ \langle s_{12} \rangle &= \frac{3}{64}(l_1 + l_2) + \frac{1}{2}(m_1 + m_2) + \langle \cos^2 \theta \rangle \left[\frac{1}{32}(l_1 + l_2) + \right. \\ &+ \left. \frac{1}{2}(m_1 + m_2) \right] + \frac{3}{64} \langle \cos^4 \theta \rangle (l_1 + l_2) + \langle \sin^2 \theta \rangle m_3 + \frac{1}{8} \langle \sin^4 \theta \rangle l_3 \\ \langle s_{13} \rangle &= \langle s_{23} \rangle = \frac{1}{4}(m_1 + m_2) + \langle \cos^2 \theta \rangle \left[\frac{1}{4}(m_1 + m_2) + m_3 \right] + \\ &+ \langle \sin^2 \theta \rangle \left[\frac{1}{2}(m_1 + m_2 + m_3) + \frac{1}{16}(l_1 + l_2) \right] + \langle \sin^2 \theta \cos^2 \theta \rangle \left[\frac{3}{16}(l_1 + l_2) + \frac{1}{2}l_3 \right] \\ \langle s_{33} \rangle &= 2 \langle \cos^2 \theta \rangle (m_3 + 2n_3) + \langle \cos^4 \theta \rangle l_3 + \langle \sin^2 \theta \rangle [m_1 + m_2 + 2(n_1 + n_2)] + \frac{3}{8} \langle \sin^4 \theta \rangle (l_1 + l_2) \\ \langle s_{44} \rangle &= \langle s_{55} \rangle = n_1 + n_2 + \langle \cos^2 \theta \rangle (n_1 + n_2 + 4n_3) + \\ &+ \langle \sin^2 \theta \rangle \left[\frac{1}{4}(l_1 + l_2) + 2(n_1 + n_2 + n_3) \right] + \langle \sin^2 \theta \cos^2 \theta \rangle \left[\frac{3}{4}(l_1 + l_2) + 2l_3 \right] \\ \langle s_{66} \rangle &= 2(\langle s_{11} \rangle - \langle s_{12} \rangle), \quad l_1 = s_{11} - 2m_1 - 4n_1 \\ l_2 &= s_{22} - 2m_2 - 4n_2, \quad l_3 = s_{33} - 2m_3 - 4n_3 \\ 2m_1 &= s_{12} + s_{13} - s_{23}, \quad 8n_1 = s_{55} + s_{66} - s_{44} \\ 2m_2 &= s_{12} + s_{23} - s_{13}, \quad 8n_2 = s_{44} + s_{66} - s_{55} \\ 2m_3 &= s_{13} + s_{23} - s_{12}, \quad 8n_3 = s_{44} + s_{55} - s_{66} \end{aligned}$$

Усреднение синусов и косинусов приводит к следующим соотношениям:

$$\begin{aligned} \langle \cos^2 \theta \rangle &= 1 + 2\alpha^2 - 2\alpha \operatorname{cth}(1/\alpha) \\ \langle \cos^4 \theta \rangle &= 1 + 12\alpha^2 + 24\alpha^4 - (4\alpha + 24\alpha^3) \operatorname{cth}(1/\alpha) \\ \langle \sin^2 \theta \rangle &= 1 - \langle \cos^2 \theta \rangle, \quad \langle \sin^2 \theta \cos^2 \theta \rangle = \langle \cos^2 \theta \rangle - \langle \cos^4 \theta \rangle \\ \langle \sin^4 \theta \rangle &= 1 - 2\langle \cos^2 \theta \rangle + \langle \cos^4 \theta \rangle \end{aligned}$$

Численные результаты приведем для поликристаллической меди. Упругие постоянные монокристалла меди в единицах 10^{10} Па равны: $c_{11} = 16,84$, $c_{12} = 12,14$, $c_{44} = 7,54$. Ось текстуры



примем совпадающей с осью четвертого порядка. На фигуре изображена зависимость модуля Юнга вдоль оси текстуры от α . Из графика видно, что вариационные границы значительно лучше энергетических, а самосогласованное решение всегда лежит внутри вариационных границ. Значение $\alpha \rightarrow \infty$ соответствует полной разупорядоченности ориентаций кристаллитов, и полученные модули упругости точно совпадают с решением задачи для изотропного поликристалла [5]. При $\alpha = 0$ оси четвертого порядка строго ориентированы вдоль оси текстуры и все приближения дают одно и то же значение.

Численные значения всех независимых компонент тензора c^* в различных приближениях в зависимости от α приведены в таблице, где c_∞ , c_0 — верхняя и нижняя энергетические границы, c_+ , c_- — верхняя и нижняя вариационные границы, c_{sc} — приближение самосогласования. Как показали расчеты, все компоненты тензора c^* монотонно изменяются при увеличении α от 0 до ∞ . Кроме того, в данном случае для каждой из компонент тензора c^* вариационные границы лежат внутри энергетических и значительно лучше последних, а самосогласованное решение находится внутри вариационных границ.

α		0,0	0,05	0,1	0,2	0,4	∞
c^*_{11}	c_{∞}	19,43	20,06	20,44	20,79	20,96	20,99
	c_+	19,01	19,56	19,89	20,18	20,32	20,35
	c_{sc}	18,79	19,29	19,61	19,94	20,09	20,13
	c_-	18,63	19,03	19,32	19,61	19,76	19,79
	c_0	18,07	18,39	18,62	18,88	19,01	19,04
c^*_{12}	c_{∞}	9,54	9,75	9,88	10,00	10,05	10,07
	c_+	9,97	10,13	10,24	10,33	10,38	10,39
	c_{sc}	10,19	10,27	10,35	10,44	10,49	10,50
	c_-	10,35	10,44	10,51	10,60	10,65	10,66
	c_0	10,90	10,91	10,93	10,99	11,03	11,04
c^*_{13}	c_{∞}	12,14	11,31	10,80	10,33	10,11	10,07
	c_+	12,14	11,44	11,01	10,61	10,42	10,39
	c_{sc}	12,14	11,56	11,16	10,74	10,54	10,50
	c_-	12,14	11,65	11,29	10,91	10,71	10,66
	c_0	12,14	11,83	11,57	11,26	11,08	11,04
c^*_{33}	c_{∞}	16,84	18,50	19,52	20,46	20,90	20,99
	c_+	16,84	18,20	19,06	19,89	20,27	20,35
	c_{sc}	16,84	18,00	18,81	19,63	20,04	20,13
	c_-	16,84	17,81	18,53	19,53	19,70	19,79
	c_0	16,84	17,46	17,89	18,60	18,96	19,04
c^*_{44}	c_{∞}	7,54	6,71	6,20	5,73	5,51	5,47
	c_+	7,54	6,22	5,64	5,20	5,02	4,98
	c_{sc}	7,54	6,16	5,53	5,05	4,86	4,82
	c_-	7,54	6,03	5,35	4,82	4,61	4,57
	c_0	7,54	5,57	4,80	4,26	4,05	4,00

ЛИТЕРАТУРА

1. Фокин А. Г. Об использовании сингулярного приближения при решении задач статистической теории упругости. — ПМТФ, 1972, № 1, с. 98–102.
2. Hashin Z., Shtrikman S. A variational approach to the theory of the elastic behaviour of polycrystals. — J. Mech. Phys. Solids, 1962, v. 10, No. 4, p. 334–352.
3. Kröner E. Berechnung der elastischen Konstanten des Vielkristalls aus den Konstanten des Einkristalls. — Z. Phys., 1958, B. 151, H. 4, S. 504–518.
4. Вологин В. В., Москаленко В. Н. К расчету макроскопических постоянных сильно изотропных композитных материалов. — Изв. АН СССР. МТТ, 1969, № 3, с. 106.
5. Шермергор Т. Д. Теория упругости микронеоднородных сред. М.: Наука, 1977.
6. Kneer G. Ueber die Berechnung der Elastizitätsmoduln vielkristalliner Aggregate mit Texture. — Phys. Stat. Solidi, 1965, v. 9, No. 3, p. 825–838.
7. Morris P. R. Elastic constants of polycrystals. — Internat. J. Engng Sci., 1970, v. 8, No. 1, p. 49–61.
8. Фокин А. Г., Шермергор Т. Д. Упругие модули текстурированных материалов. — Инж. ж. МТГ, 1967, № 1, с. 129–134.
9. Лифшиц И. М., Розенцвейг Л. Н. О построении тензора Грина для основного уравнения теории упругости в случае неограниченной уругоанизотропной среды. — ЖЭТФ, 1947, т. 17, вып. 9, с. 783–791.
10. Барышников В. Г., Шермергор Т. Д. Анизотропия упругих модулей листовой трансформаторной стали. — Физика и химия обработки материалов, 1970, № 2.
11. Александров К. С., Талашкевич И. П. Упругие константы аксиальных текстур в приближении Фойгта – Ройса – Хилла. — ПМТФ, 1968, № 2, с. 48–50.
12. Талашкевич И. П. Упругие постоянные аксиальных текстур металлов. — Изв. АН СССР. Сер. физ., 1979, № 7, с. 1377–1379.
13. Bunge H. J., Ebert R., Güntner F. On the angular variation and texture dependence of Young's modulus in cold-rolled copper sheet. — Phys. Stat. Solidi, 1969, v. 31, No. 2, p. 565–569.
14. Shermegor T. D., Patlazhan S. A. Elastic constants of quasiisotropic polycrystals. — Phys. Stat. Solidi (a), 1976, v. 38, No. 1, p. 375–381.
15. Hashin Z., Shtrikman S. On some variational principles in anisotropic and nonhomogeneous elasticity. — J. Mech. Phys. Solids, 1962, v. 10, No. 4, p. 335–342.
16. Вишняков Я. Д., Бабаржо А. Я., Владимиров С. А., Эгиз И. В. Теория образования текстур в металлах и сплавах. М.: Наука, 1979. 343 с.

Москва

Поступила в редакцию
14.XII.1981