

PACS numbers: 46.35.+z, 46.50.+a, 62.20.D-, 62.20.F-, 81.40.Jj, 81.40.Lm

Анализ соотношений между локальными и общими механическими параметрами, применяемыми для описания поведения поликристаллических материалов

В. Ю. Марина, В. И. Марина

*Технический университет Молдовы,
бульв. Штефан чел Маре, 168
MD-2004 Кишинёв, Молдова*

Проводится сопоставление соотношений между локальными и общими механическими параметрами, полученными в рамках модели самосогласования Крёнера и экстремума несоответствия макроскопических мер с соответствующими усреднёнными значениями микроскопических аналогов. Показано, что макроскопическое значение модуля сдвига, найденное на основе модели Крёнера, всегда больше, чем соответствующее значение, вычисленное на основе принципа несоответствия экстремума мер. Установлено фундаментальное неравенство между коэффициентом анизотропии кристаллов с кубической решёткой и коэффициентом Пуассона соответствующего поликристаллического материала. Исследуется закон взаимодействия между элементами структуры в необратимой области, полученной на основе принципа несоответствия мер в предположении об однородной изотропной упругости материальных частиц.

Ключевые слова: тензор напряжения, тензор деформации, анизотропия структуры, монокристалл, поликристалл.

Проводиться зіставлення співвідношень між локальними і загальними механічними параметрами, отриманими в рамках моделі самоузгодження Крьонера і екстремуму невідповідності макроскопічних мір з відповід-

Corresponding author: Viorica Ionashevna Marina
E-mail: marina_viorica@yahoo.com

*Technical University of Moldova,
168 Stefan cel Mare Blvd., MD-2004 Kishinev, Moldova*

Citation: V. Yu. Marina and V. I. Marina, Analysis of the Relationship Between Local and General Mechanical Parameters Used to Describe the Behaviour of Polycrystalline Materials, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, 42, No. 3: 415–431 (2020) (in Russian), DOI: [10.15407/mfint.42.03.0415](https://doi.org/10.15407/mfint.42.03.0415).

ними усередненими значеннями мікроскопічних аналогів. Показано, що макроскопічне значення модуля зсуву, знайдене на основі моделі Кронера, завжди більше, ніж відповідне значення, обчислене на основі принципу невідповідності екстремума мір. Встановлено фундаментальну нерівність між коефіцієнтом анізотропії кристалів з кубічними ґратницями і коефіцієнтом Пуассона відповідного полікристалічного матеріалу. Досліджується закон взаємодії між елементами структури в необоротній області, отриманий на основі принципу невідповідності мір у припущенні щодо однорідної ізотропної пружності матеріальних частинок.

Ключові слова: тензор напруження, тензор деформації, анізотропія структури, монокристал, полікристал.

The correlation of relationships among local and mechanical parameters obtained within the framework of self-consistent Kroners model and extreme of irrelevance of macroscopic measures with averaging of their microscopic analogues are developed. As shown, the macroscopic value of the shear modulus found on the basis of the Kroner model is always greater than the corresponding value calculated on the basis of the principle of extreme of measures' inconsistency. Fundamental inequality is established between the anisotropy coefficient of crystals with a cubic lattice and the Poisson ratio of the corresponding polycrystalline material. The law of interaction between elements of the structure in an irreversible region obtained on the basis of the principle of inconsistency of measures under the assumption of homogeneous isotropic elasticity of material particles is investigated.

Key words: tensor of stress, tensor of strain, structure anisotropy, single crystal, polycrystal.

(Получено 15 июля 2019 г.; окончат. вариант — 24 октября 2019 г.)

1. ВВЕДЕНИЕ

Проблемы установления определяющих уравнений являются одной из первостепенных задач механики твёрдого деформированного тела. К наиболее плодотворным принципиальным концепциям, применяемым при создании современных теорий определяющих уравнений, относится идея, согласно которой макроскопический однородный элемент представляется в виде конечного или бесконечного числа связанных между собой подэлементов наделённых простейшими свойствами: упругостью, вязкопластичностью и упрочнением, вызванными необратимой деформацией. Несмотря на то, что подэлементы обладают только элементарными свойствами в силу взаимодействия между ними, их совокупность даёт возможность описать свойства запаздывания скалярных и тензорных свойств при сложном нагружении, дискретную механическую память при циклическом неизотермическом нагружении по прямолинейным траекториям, эффекты, связанные с запаздыванием текучести и

т.д. В этих подходах, сложная картина внешне не связанных между собой особенностей необратимого деформирования материалов, проявляемых при различных программных изменениях нагрузки и температуры, становится обозримой и взаимосвязанной.

Пусть ΔV_0 — область, которая занимает один макроэлемент поликристаллического тела, который содержит достаточное для осреднённого описания количество структурных элементов, ΔS_0 — ограничивающая его поверхность, \bar{t}_{ij} и \bar{d}_{ij} — тензоры напряжений и деформаций в каждой точке области ΔV_0 соответственно. Внутри области ΔV_0 удовлетворяются уравнения равновесия и геометрические соотношения Коши

$$\bar{t}_{ij} + b_i = 0, \quad \bar{d}_{ij} = \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i}), \quad (1)$$

а на поверхности ΔS_0 выполняются следующие граничные условия

$$\bar{u}_i / \Delta S_0 = d_{ij} x_j, \quad d_{ij} = \text{const}, \quad p_i^{(n)} / \Delta S_0 = t_{ij} n_j, \quad t_{ij} = \text{const}. \quad (2)$$

Здесь через d_{ij} и t_{ij} обозначены тензоры макроскопических деформаций и напряжений. На основе (1)–(4) Р. Хилл получил следующие соотношения [1]:

$$t_{ij} = \langle t_{ij} \rangle = \frac{1}{\Delta V_0} \int_{\Delta V_0} \bar{t}_{ij} dV, \quad d_{ij} = \langle d_{ij} \rangle = \frac{1}{\Delta V_0} \int_{\Delta V_0} \bar{d}_{ij} dV, \quad (3)$$

$$\langle \bar{t}_{ij} \bar{d}_{ij} \rangle = \langle \bar{t}_{ij} \rangle \langle \bar{d}_{ij} \rangle = t_{pq} d_{pq}, \quad (4)$$

где $\langle \dots \rangle$ — знак осреднения по объёму ΔV_0 .

Уравнения (3), (4) необходимы, но недостаточны для определения зависимости между макроскопическими напряжениями и деформациями, если заданы соотношения между микроскопическими напряжениями и деформациями.

2. УРАВНЕНИЯ СВЯЗИ МИКРОСОСТОЯНИЙ С МАКРОСОСТОЯНИЕМ. МОДЕЛЬ КРЁНЕРА

Для того, чтобы связать микросостояние с макросостоянием используются различные модели взаимодействий. Так, для вычисления макроскопических констант упругости поликристаллических материалов Войгт в 1928 году предложил модель $\bar{d}_{ij} = d_{ij}$, а А. Рейсом в 1929 году предложено считать $\bar{t}_{ij} = t_{ij}$. Далее эти варианты использовались различными авторами для описания поведения материалов при необратимом неизотермическом нагружении. Для одновременного учёта неравномерности деформирования и нагружения

Крёнер [2] сформулировал так называемую «самосогласованную схему», относящуюся к проблеме включения в бесконечную матрицу. Согласно его схеме, каждое зерно поликристалла последовательно рассматривается как включение в «матрицу» всех других зёрен. Поведение поликристалла затем рассчитывается с помощью некоторого адекватного осреднения по всем зёрнам.

Подход Крёнера приводит к очень удобному «априорному» закону взаимодействия, который легко выводится из решения задачи включения, как было у Эшелби (1957). Это упрощение основано на упругом взаимодействии между «матрицей» и включением, в результате которого Крёнер получил следующее кинематическое уравнение связи:

$$\bar{t}_{ij} - t_{ij} = 3b_1 (d_{kk} - \bar{d}_{kk}) \delta_{ij} + 2b_2 (d_{ij} - \bar{d}_{ij}), \quad (5)$$

где константы b_1 и b_2 можно представить в виде

$$b_1 = 2G \frac{3 - 5\nu}{8 - 10\nu}, \quad 2b_2 = 2G \frac{7 - 5\nu}{8 - 10\nu}, \quad (6)$$

где G — модуль сдвига, ν — коэффициент Пуассона.

Переходя в (4) и (5) от тензоров напряжений и деформаций к девиаторным и шаровым составляющим

$$\bar{t}_{ij} = \bar{\sigma}_{ij} + \bar{\sigma}_0 \delta_{ij}, \quad (7)$$

получим

$$\langle (\bar{\sigma}_{ij} - \sigma_{ij})(\bar{\varepsilon}_{ij} - \varepsilon_{ij}) + 3(\bar{\sigma}_0 - \sigma_0)(\bar{\varepsilon}_0 - \varepsilon_0) \rangle = 0, \quad (8)$$

$$\bar{\sigma}_{ij} - \sigma_{ij} = 2b_2 (\varepsilon_{ij} - \bar{\varepsilon}_{ij}), \quad (9)$$

$$\bar{\sigma}_0 - \sigma_0 = (3b_1 + 2b_2)(\varepsilon_0 - \bar{\varepsilon}_0). \quad (10)$$

Подставляя (9) и (10) в (8), убеждаемся, что в модели Крёнера выражение

$$\langle -2b_2 (\varepsilon_{ij} - \bar{\varepsilon}_{ij})(\bar{\varepsilon}_{ij} - \varepsilon_{ij}) - (3b_1 + 2b_2)(\varepsilon_0 - \bar{\varepsilon}_0) \rangle$$

равно нулю только в двух предельных случаях $\bar{d}_{ij} = d_{ij}$ или $\bar{t}_{ij} = t_{ij}$. Таким образом, одновременный учёт неоднородностей деформирования и нагружения в элементе ΔV_0 не может быть описан на основе выражения (5).

Отметим, что не согласуются с фундаментальным выражением Хилла (4) и с первым законом термодинамики и различные модификации модели Крёнера [3].

3. УРАВНЕНИЯ СВЯЗИ МИКРОСОСТОЯНИЙ С МАКРОСОСТОЯНИЕМ В МОДЕЛИ МАРИНА

Для получения замкнутой системы уравнений соотношения Хилла (3), (4) дополнены тремя принципами. Из опыта известно, что механизмы деформирования структурных элементов внутри конгломерата (объёма ΔV_0) приводят к процессу самосогласования (когерентности) процессов деформирования и нагружения. Положение о явлении самосогласования таких процессов учитывается на основе принципа осреднённых связей [4, 5] — взаимодействия между подэлементами (элементами структуры) в конгломерате формируются под влиянием одних осреднённых связей.

Исходя из этого и соотношения (8) в работах [4, 6] был сделан вывод, что флуктуации напряжений являются нелинейными функциями флуктуаций деформаций. Линейные соотношения связи микросостояний с макросостоянием принимаем только для девиаторных составляющих [4]

$$\bar{\sigma}_{ij} - \sigma_{ij} = B(\varepsilon_{ij} - \bar{\varepsilon}_{ij}), \quad (11)$$

где $B \neq 2b_2$ — внутренний параметр, содержащий информацию о микроскопических характеристиках подэлементов. Для получения второго типа уравнений связи микросостояний и макросостояния принят постулат, согласно которому скалярное внутреннее произведение между тензорами флуктуаций напряжений и флуктуаций деформаций равно нулю. В этом случае выражение (8) выполняется для каждого подэлемента

$$(\bar{\sigma}_{ij} - \sigma_{ij})(\varepsilon_{ij} - \bar{\varepsilon}_{ij}) + 3(\bar{\sigma}_0 - \sigma_0)(\bar{\varepsilon}_0 - \varepsilon_0) = 0. \quad (12)$$

Отметим, что выражение (12) предполагается справедливым и на участке неупругого изменения объёма, связанного с увеличением плотности дислокации и микротрещин. Таким образом, выражения (11), (12) при условии, что внутренний параметр b известен, позволяют связать микросостояния с макросостоянием. Для определения неизвестного внутреннего параметра b в работе [6] был предложен принцип экстремума несоответствия макроскопических мер с подходящими средними значениями микроскопических аналогов. Суть названного принципа заключается в следующем: из (3), (4) видно, что усреднения по объёму напряжений, деформаций и их произведений единственным образом зависят от данных на поверхности конгломерата. Однако, не все микроскопические переменные обладают этим специфическим свойством. В частности,

$$\langle \bar{\sigma}_{ij} \bar{\varepsilon}_{ij} \rangle \neq \langle \bar{\sigma}_{ij} \rangle \langle \bar{\varepsilon}_{ij} \rangle, \quad \langle \bar{\sigma}_0 \bar{\varepsilon}_0 \rangle \neq \langle \bar{\sigma}_0 \rangle \langle \bar{\varepsilon}_0 \rangle. \quad (13)$$

Соотношение типа

$$\Delta = \langle \bar{\sigma}_{ij} \bar{\varepsilon}_{ij} \rangle - \langle \bar{\sigma}_{ij} \rangle \langle \bar{\varepsilon}_{ij} \rangle, \quad (14)$$

которое зависит не только от данных на поверхности конгломерата, но и от его структуры, в [6] было названо несоответствием мер. Так как в двух предельных вариантах $\bar{t}_{ij} = \langle \bar{t}_{ij} \rangle$, $\bar{d}_{ij} = \langle \bar{d}_{ij} \rangle$ несоответствие Δ равно нулю, то всегда существует некоторая промежуточная схема взаимодействия между подэлементами, для которой Δ принимает экстремальное значение. Согласно принципу, сформулированному в работах [6, 7], во всех реальных взаимодействиях несоответствие Δ принимает экстремальное значение

$$\langle \bar{\sigma}_{ij} \bar{\varepsilon}_{ij} \rangle - \langle \bar{\sigma}_{ij} \rangle \langle \bar{\varepsilon}_{ij} \rangle = \text{Extr}. \quad (15)$$

На основе замкнутой системы уравнений (3), (4), (11), (12) и (15) удаётся конструировать в статистическом приближении макроскопические определяющие уравнения, если известны зависимости между микронапряжениями и деформациями.

Рассмотрим общую схему применения уравнений (11) и (15) на примере нахождения констант макроупругости поликристаллических материалов с кубической решёткой.

Записывая (11) в кристаллографической системе координат, в которой макроскопические величины определяются на основе закона преобразования компонент тензора второго ранга, найдём

$$\bar{\varepsilon}'_{ij} = \begin{cases} \frac{(B + 2G)\bar{r}_{in}\bar{r}_{jm}\varepsilon_{nm}}{c_{11} - c_{12} + B}, & i = j, \\ \frac{(B + 2G)\bar{r}_{in}\bar{r}_{jm}\varepsilon_{nm}}{2c_{44} + B}, & i \neq j, \end{cases} \quad (16)$$

где c_{11} , c_{12} , c_{44} — независимые упругие постоянные кубических монокристаллов, \bar{r}_{in} — направляющие косинусы кристаллографических осей относительно глобальной системы координат x_i . Учитывая в (15) равенства $\bar{\varepsilon}'_{ij}\bar{\varepsilon}'_{ij} = \bar{\varepsilon}_{nm}\bar{\varepsilon}_{nm}$, $\langle \bar{\varepsilon}_{ij} \rangle \langle \bar{\varepsilon}_{ij} \rangle = \bar{\varepsilon}_{nm}\bar{\varepsilon}_{nm}$ и переходя от усреднения по объёму к усреднению по фактору ориентации Ω , установим следующее выражение для исследуемого несоответствия мер [6]:

$$\frac{3B(2c_{44} - c_{11} + c_{12})^2 \sigma_{ij} \varepsilon_{ij}}{[5B + 4c_{44} + 3(c_{11} - c_{12})][5c_{44}(c_{11} - c_{12}) + (3c_{44} + c_{11} + c_{12})B]} = \text{Extr}, \quad (17)$$

$$\frac{5}{2G + B} = \frac{3}{2c_{44} + B} + \frac{2}{c_{11} - c_{12} + B}. \quad (18)$$

Из условия $\frac{\partial \Delta}{\partial B} = 0$, из (17) находим

$$B = \sqrt{\frac{c_{44}(c_{11} - c_{12})[4c_{44} + 3(c_{11} - c_{12})]}{3c_{44} + c_{11} - c_{12}}} = 2c_{44}\sqrt{\frac{2A + 3}{A(3A + 2)}}, \quad (19)$$

а затем из (18) устанавливаем значение модуля сдвига G

$$G = \sqrt{\frac{c_{44}(c_{11} - c_{12})[3c_{44} + c_{11} - c_{12}]}{4c_{44} + 3(c_{11} - c_{12})}} = c_{44}\sqrt{\frac{3A + 2}{A(2A + 3)}}, \quad (20)$$

где $A = \frac{2c_{44}}{c_{11} - c_{12}}$ — фактор анизотропии монокристалла. Формулу (20) можно представить ещё в виде:

$$G = \sqrt{G_R G_v}, \quad G_v = \frac{3c_{44} + c_{11} - c_{12}}{5}, \quad G_R = \frac{5c_{44}(c_{11} - c_{12})}{4c_{44} + 3(c_{11} - c_{12})}, \quad (21)$$

где G_v — модуль сдвига, полученный Войгтом ($\bar{d}_{ij} = d_{ij}$), G_R — модуль сдвига, полученный Рейсом ($\bar{t}_{ij} = t_{ij}$).

Таким образом, из принципа несоответствия мер следует, что макроскопический модуль сдвига равен среднегеометрическому значению модулей сдвига, полученных в двух предельных вариантах: однородное деформированное состояние и однородное напряжённое состояние. Различия между расчётными и экспериментальными значениями модуля сдвига не превышают 5% и, как правило, находятся в пределах разброса экспериментальных данных. С учётом полученных значений B и G , относительное несоответствие энергии изменения формы определяется простой формулой [6]

$$\frac{(\langle \bar{\sigma}_{ij} \bar{\varepsilon}_{ij} \rangle - \langle \bar{\sigma}_{ij} \rangle \langle \bar{\varepsilon}_{ij} \rangle)}{\langle \bar{\sigma}_{ij} \rangle \langle \bar{\varepsilon}_{ij} \rangle} = -6 \left(\frac{A - 1}{5\sqrt{A} + \sqrt{(2 + 3A)(3 + 2A)}} \right)^2. \quad (22)$$

Для меди ($A = 3,21$) макроскопическая мера энергии изменения форм больше, чем осреднённое значение микромер на 7,8%, а макроскопическая мера энергии изменения объёма меньше, чем осреднённое значение на 7,8%.

4. СОПОСТАВЛЕНИЕ МОДЕЛЕЙ КРЁНЕРА И МАРИНА В ОБРАТИМОЙ ОБЛАСТИ ДЕФОРМИРОВАНИЯ

Хотя модель Марина отличается от модели Крёнера не только в количественном соотношении, но и в качественном (несоответствия

макроскопических мер с подходящими средними значениями микроскопических аналогов), имеется сходство в выражениях (10) и (11), которые отличаются только в способе определения параметров b_2 и B . На основе представления $B = 2Gb$, формулу (18) можно представить в виде

$$G = \frac{c_{44}}{10bA} \left[b(2 + 3A) - 3 - 2A + \sqrt{[b(2 + 3A) - 3 - 2A]^2 + 100bA} \right], \quad (23)$$

где в модели Крёнера согласно (6)

$$b = b_k(\nu) = (7 - 5\nu)(8 - 10\nu)^{-1}, \quad (24)$$

а в модели Марина согласно (19), (20)

$$b = b_m(A) = (3 + 2A)(2 + 3A)^{-1}. \quad (25)$$

Таким образом, в упругой области параметр b в модели Крёнера выражается через коэффициент Пуассона ν , а в модели Марина — через фактор анизотропии кристаллов. В связи с тем, что между ν и A не существует однозначной зависимости, возможна только качественная сопоставимость. С этой целью на рис. 1 сопоставлены зависимости $b_k = b_k(\nu)$ и $b_m = b_m(A)$ (в масштабе 0,1A).

В интервале $1,32 < A < 2,0$ возможны совпадения b_k и b_m только при малых значениях коэффициента Пуассона $0 < \nu < 0,132$, а в случае $A < 1,32$ — при средних и больших значениях $0,132 < \nu < 0,50$.

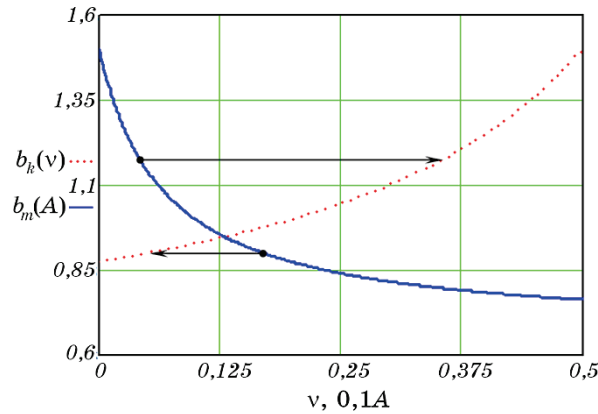


Рис. 1. Сопоставление законов изменения параметра b в моделях Крёнера и Марина.

Fig. 1. Comparison of the laws of change of parameter b in Kroner and Marina models.

Если $A \geq 2$, то всегда $b_m < b_k$ и, следовательно, $G_k > G_m$. Более детальный анализ формулы (23) показывает, что при $A < 1,32$, G не зависит от b , поэтому

$$G_k \approx G_m, A < 1,32; G_k > G_m, A > 1,32. \quad (26)$$

На основе (26) установим следующее фундаментальное неравенство

$$G_k \geq G_m. \quad (27)$$

Следовательно, модуль сдвига, полученный в рамках модели Крёнера G_k , больше или равен модулю сдвига, полученному в модели Марина. Сопоставление значений G_k , G_m с экспериментальными данными для 8 материалов [8, 9] приводится в табл. 1. Теоретические значения для G_m , приведённые в табл. 1, вычислялись по формуле (20), а G_k определялись из кубического уравнения [2]

$$G_k^3 + a_1 G_k^2 + a_2 G_k + a_3 = 0, \quad (28)$$

которое следует из модели Крёнера в случае однофазных поликристаллических материалов с кубической решёткой. Коэффициенты a_1, a_2, a_3 определяются на основе следующих выражений:

$$a_1 = \frac{1}{8}(5c_{11} + 4c_{12}), \quad a_2 = -\frac{1}{8}(7c_{11} - 4c_{12})c_{44},$$

ТАБЛИЦА 1. Экспериментальные и расчётные константы упругости.

TABLE 1. Experimental and calculated elasticity constants.

| Элемент | Монокристалл, 10^4 МН/м ² | | | Поликристалл, 10^4 МН/м ² | | |
|------------------|--|----------|----------|--|-------|-------|
| | c_{11} | c_{12} | c_{44} | G_{exp} | G_m | G_k |
| MgO | 29,60 | 9,15 | 15,56 | 12,93 | 13,05 | 13,06 |
| CuF ₂ | 16,40 | 5,30 | 3,37 | 4,07 | 4,12 | 4,12 |
| ZnS | 9,76 | 5,90 | 4,51 | 3,18 | 3,19 | 3,23 |
| ZnSe | 8,10 | 4,88 | 4,41 | 2,88 | 2,93 | 2,97 |
| CdTe | 5,35 | 3,68 | 1,99 | 1,38 | 1,40 | 1,42 |
| Al | 10,82 | 6,13 | 2,85 | 2,64 | 2,64 | 2,64 |
| Fe | 23,70 | 14,10 | 11,60 | 7,85 | 8,11 | 8,21 |
| Au | 18,60 | 15,70 | 4,20 | 2,77 | 2,72 | 2,81 |
| Cu | 16,84 | 12,14 | 7,54 | 4,42 | 4,68 | 4,82 |

$$a_3 = -\frac{1}{8}(c_{11} + 2c_{12})(c_{11} - c_{12})c_{44}.$$

Сопоставляя расчётные данные, приведённые в табл. 1, убеждаемся, что исследуемые модели хорошо согласуются с опытными данными. При этом G_m ближе к G_{exp} , чем G_k . Важно заметить, что и процедура расчёта по формуле (20) более проста, чем по уравнению (28).

5. АНАЛИЗ МОДЕЛЕЙ В НЕОБРАТИМОЙ ОБЛАСТИ В СЛУЧАЕ ОДНОРОДНОЙ И ИЗОТРОПНОЙ УПРУГОСТИ

В связи с тем, что модель Крёнера приписывает внешней фазе такую осреднённую изотропную связь, что агрегат в действительности оказывается таким, как если бы приращения его деформации всегда были чисто упругими, параметры b_k не меняются при переходе за пределы упругости. Принципиально другое следствие вытекает из принципа (15).

Принцип экстремума несоответствия макроскопических мер с подходящими средними значениями микроскопических аналогов применим для описания любых процессов обратимого и необратимого деформирования.

Чтобы формализовать поведение поликристаллического материала, приходится прибегать к разным упрощающим задачу предположениям. Самое простое заключается в том, что мельчайшие единицы структуры при необратимом деформировании предполагают подэлемент, который отождествляется со множеством всех материальных частиц внутри ΔV_0 , имеющих одинаковый девиатор необратимых деформаций [4]. Частицы, принадлежащие одному и тому же подэлементу, могут иметь различные положения и ориентации кристаллической решётки в представительном объёме ΔV_0 . Количество всех частиц с одинаковым девиатором необратимых деформаций определяет вес одного подэлемента. Так как зёрна в поликристаллах деформируются неравномерно, то согласно принятому определению масса или объём одного подэлемента могут быть сколько угодно малыми величинами. В силу этих замечаний область ΔV_0 , которую занимает один макроэлемент поликристаллического тела с ограничивающей поверхностью ΔS_0 , представим в виде бесконечного числа связанных между собой подэлементов, имеющих различные термореологические свойства. Такая идеализация кристаллической среды вполне разумна. При описании необратимого поведения конгломерата наиболее важна оценка влияния неоднородности развития необратимых деформаций внутри ΔV_0 на макроскопическую зависимость между напряжениями и деформациями.

Как и в случае обратимого деформирования, взаимосвязь между микросостоянием и макросостоянием устанавливается на основе выражений (3), (4), (11), (12) и (15). При этом компоненты девиаторов деформаций $\bar{\varepsilon}_{ij}$ и ε_{ij} представляются в виде суммы обратимых \bar{e}_{ij} , e_{ij} и необратимых компонент \bar{p}_{ij} , p_{ij}

$$\bar{\varepsilon}_{ij} = \bar{e}_{ij} + \bar{p}_{ij}, \quad \varepsilon_{ij} = e_{ij} + p_{ij}. \quad (29)$$

Тензорные свойства подэлементов в «свободном» состоянии задаются в предположении, что компоненты девиатора упругих деформаций \bar{e}_{ij} могут быть разложены вдоль \bar{p}_{ij} и $\frac{d\bar{p}_{ij}}{d\lambda}$:

$$e_{ij}(\psi) = \left[\tau(\psi, \bar{\gamma}, \bar{\nu}) + \bar{s} \right] \frac{d\bar{p}_{ij}}{d\lambda} + \bar{r} \frac{\bar{p}_{ij}}{\bar{p}}, \quad p = \sqrt{p_{ij} p_{ij}}, \quad d\bar{\lambda} = \sqrt{d\bar{p}_{ij} d\bar{p}_{ij}},$$

где τ зависит от параметра скорости необратимого деформирования $\bar{\gamma} = \dot{\lambda} = \sqrt{\dot{\bar{p}}_{ij} \dot{\bar{p}}_{ij}}$, неупругого изменения объёма $\bar{\nu}$ и параметров изотропного S и кинематического упрочнения \bar{r} . В качестве параметра, определяющего принадлежность параметров состояния к определённому подэлементу, выбирается вес необратимо деформированных подэлементов ψ ($0 \leq \psi \leq 1$) в момент его перехода за пределы упругости при первоначальном нагружении. Обратим внимание на то обстоятельство, что в дальнейшем осреднение будет производиться не по объёму, а по множеству реализаций, т.е. мы считаем правомерным пользоваться эргодической гипотезой. В этом случае соотношения (3) и (4) представим в виде:

$$t_{ij} = \int_0^1 \bar{t}_{ij}(\psi) d\psi, \quad d_{ij} = \int_0^1 \bar{d}_{ij}(\psi) d\psi, \quad (30)$$

$$\int_0^1 \bar{\sigma}_{ij} \bar{\varepsilon}_{ij} d\psi - \sigma_{ij} \varepsilon_{ij} = \text{Extr}. \quad (31)$$

Исследования поведения рассматриваемой модели при различных монотонных и немонотонных процессах пропорционального или сложного нагружения проводились в работах [4, 5]. Определяющие уравнения для неизотермических реономных процессов при циклическом нагружении, которые содержат и закон о дискретной механической памяти материала, рассматривались в [5]. В данной работе делается акцент на сопоставлении уравнений связи микросостояний с макросостоянием, основанных на фундаментальных концепциях. Чтобы результаты сопоставления были более очевид-

ными, будем ограничиваться случаем пропорционального монотонного нагружения

$$\frac{\sigma_{ij}}{\sigma} = \frac{\varepsilon_{ij}}{\varepsilon} = \frac{\bar{\sigma}_{ij}}{\bar{\sigma}} = \frac{\bar{\varepsilon}_{ij}}{\bar{\varepsilon}}, \quad \sigma = \sqrt{\sigma_{ij}\sigma_{ij}}, \quad \varepsilon = \sqrt{\varepsilon_{ij}\varepsilon_{ij}}. \quad (32)$$

Уравнения связи микросостояний с макросостоянием (23) с учётом (32) и предложения однородной и изотропной упругости можно представить в виде

$$\bar{e} - e = b(\varepsilon - \bar{\varepsilon}), \quad \bar{e} = \frac{\bar{\sigma}}{2G}, \quad e = \frac{\sigma}{2G} \quad (33)$$

или

$$\bar{e} - e = m(p - \bar{p}), \quad m = \frac{b}{1+b}, \quad p = \varepsilon - e. \quad (34)$$

В процессе необратимого деформирования происходит изменение структуры материала, что приводит к упрочнению подэлементов (изотропному и кинематическому). В линейном приближении принимаются следующие законы упрочнения

$$\bar{S} = a_0 \bar{\lambda}, \quad S = \int_0^1 a_0 \lambda d\psi, \quad \bar{r} = a\bar{p}, \quad (35)$$

где через a_0 и a обозначены коэффициенты изотропного и кинематического упрочнения соответственно. Скрытое упрочнение, которое всегда имеет место при необратимом деформировании, рассчитывается путём перехода от локального изотропного упрочнения

$\bar{S} = a_0 \bar{\lambda}$ к осреднённому упрочнению $S = \int_0^1 a_0 \bar{\lambda} d\psi$. С учётом этих замечаний величину \bar{e} в необратимо деформированных подэлементах можно представить в виде

$$\bar{e} = \tau + a_0 p + a\bar{p}. \quad (36)$$

При записи (36) учитывалось, что при первоначальном пропорциональном нагружении $\bar{\lambda} = \bar{p}$ и $\int_0^1 \bar{p} d\psi = p$. Подставляя (36) в (34),

получим следующее выражение для модуля девиатора тензора необратимых деформаций

$$\bar{p} = \frac{e + (m - a_0)p - \tau}{a + m}. \quad (37)$$

В момент выхода за пределы текучести данного подэлемента ($t = t'$), $\bar{p} = 0$, поэтому

$$\tau(\tilde{e}) = \tilde{e} + (m - a_0)\tilde{p}, \quad p = f(e), \quad (38)$$

где через \tilde{e} , \tilde{p} обозначены соответствующие значения e , p в момент выхода за пределы упругости подэлемента с пределом текучести τ . Предполагая, что τ для данного подэлемента постоянная величина и, дифференцируя (37) по e с учётом выражений

$$\bar{p}(a + m) = e + (m - a_0) - \tau, \quad \int_0^{\psi'} d\bar{p}d\psi = dp, \quad \int_0^{\psi'} \bar{p}d\psi = p,$$

установим следующее параметрическое выражение для интегральной функции распределения величины τ

$$\psi(e, m) = \frac{(a + m)p_{,e}}{1 + (m - a_0)p_{,e}}, \quad p_{,e} = \frac{\partial p}{\partial l}. \quad (39)$$

Подставляя (38) в (36) и учитывая, что $\bar{\varepsilon} = \bar{e} + \bar{p}$, получим следующие выражения для обратимых \bar{e} и полных деформаций $\bar{\varepsilon} = \sqrt{\bar{\varepsilon}_{ij}\bar{\varepsilon}_{ij}}$

$$\bar{e}(e, \tilde{e}, m) = \frac{m[e' + (m - a_0)p(e')] + a[e + (m - a_0)p(e)]}{a + m} + a_0p(e), \quad (40)$$

$$\begin{aligned} \bar{\varepsilon}(e, \tilde{e}, m) &= \\ &= \frac{(m - 1)[\tilde{e} + (m - a_0)p(\tilde{e})] + (a + 1)[e + (m - a_0)p(e)]}{a + m} + a_0p(e). \end{aligned} \quad (41)$$

Формулы (40), (41) справедливы для подэлементов, деформированных за пределами упругости ($e < \tilde{e}$). В подэлементах, работающих при данном e в обратимой области $e = \tilde{e}$, имеем

$$\bar{e}(e, \tilde{e}, m) = \bar{\varepsilon}(e, \tilde{e}, m) = e + mp(e). \quad (42)$$

На основе формул (39)–(41) составим выражения (31), из которых можно установить закон изменения внутреннего параметра m

$$\begin{aligned} &\int_{e_y}^e \bar{e}(e, \tilde{e}, m)\bar{\varepsilon}(e, \tilde{e}, m)y(\tilde{e}, m)d\tilde{e} + \\ &+ [1 - \psi(e)][e + mp(e)]^2 - e(e + p(e)) = \text{Extr}, \end{aligned} \quad (43)$$

где $y(\tilde{e}) = \frac{d\psi}{d\tilde{e}}$ определяется на основе (39)

$$y(\bar{e}, m) = \frac{d\psi(e', m)}{d\bar{e}} = \frac{(a+m)p_{,e\bar{e}}}{[1+p_{,e}(m-a_0)]^2}, \quad p_{,e\bar{e}} = \frac{\partial^2 p}{\partial \bar{e}^2}, \quad (44)$$

e_y — макроскопический предел упругости.

На основе (39)–(44), после ряда преобразований получим

$$\Delta(e, m) = 4G \frac{m^2 - m}{a + m} \left(\int_{e_y}^e p(e) de - \frac{a + a_0}{2} p^2 \right) = \text{Extr}. \quad (45)$$

Дифференцируя по m выражение (45) и приравнявая полученное равенство к нулю, найдём

$$m = -a + \sqrt{a + a^2}. \quad (46)$$

Формула (46) была получена в [4] из условия экстремума скрытой энергии изменения объёма u_{oc} . Таким образом, из анализа экстремума различных несоответствий следует одна и та же формула (46), которую при $a_0 = 0$ можно представить в более компактном виде

$$b = \sqrt{\chi}, \quad b = \frac{m}{1-m}, \quad \chi = \frac{a}{1+a} = \frac{\Delta \bar{e}}{\Delta \bar{\varepsilon}}. \quad (47)$$

В связи с тем, что $\chi < 1$, из (47) следует $b < 1$, $m < 0,5$. Обратим внимание, что из (25) для упруго изотропных подэлементов ($A = 1$) $b = 1$. Следовательно, неравенства

$$0 \leq b \leq 1, \quad 0 \leq m \leq 0,5 \quad (48)$$

подтверждаются, как из анализа поведения микронеоднородной изотропной упругой среды, так и из анализа поведения модели с различными локальными пределами текучести, но с одинаковыми упругими постоянными.

Отметим, что коэффициент пропорциональности между флуктуациями девиаторов тензоров напряжений и деформаций b , найденный по формуле (47), примерно на один порядок меньше, чем полученный на основе модели Крёнера.

Из анализа выражения (45) следует, что абсолютное значение несоответствия $\Delta = \Delta(e, m)$ возрастает с увеличением e (при $m = \text{const}$), однако его относительное значение

$$\tilde{\Delta} = \frac{\langle \bar{\sigma}_{ij} \bar{\varepsilon}_{ij} \rangle - \langle \bar{\sigma}_{ij} \rangle \langle \bar{\varepsilon}_{ij} \rangle}{\langle \bar{\sigma}_{ij} \rangle \langle \bar{\varepsilon}_{ij} \rangle} = 2 \frac{m^2 - m}{a + m} \frac{\int_{e_y}^e p(e) de - (a + a_0) p(e)^2 / 2}{e(e + p(e))} \quad (49)$$

изменяться по более сложному закону. На рисунке 2 представлены графики $\tilde{\Delta} = \Delta(e, m)$ при различных постоянных значениях $e = \text{const}$. Численные исследования проводились на основе диаграммы деформирования стали 10X12M при температуре $T = 450^\circ\text{C}$ [10]. В результате обработки соответствующей диаграммы получена зависимость

$$p(e) = 2 \left(\frac{e}{e_y - 1} \right)^3, \quad e_y = 8 \cdot 10^{-4}, \quad a = a_0 = 0,014.$$

Из рисунка 2 видно, что относительное несоответствие $|\tilde{\Delta}|$ сначала увеличивается до значения $|\tilde{\Delta}| \cong 16\%$, а затем уменьшается. В момент наступления текучести в наиболее сильном подэлементе ($\psi = 1$) $\tilde{\Delta} = 7\%$. Таким образом, в рамках приближения однородной и изотропной упругости параметр b , отражающий неоднородность деформирования и нагружения подэлементов внутри конгломерата, зависит от коэффициента упрочнения χ ($b = \sqrt{\chi}$). Из (46) и (47) следует, что при постоянном коэффициенте упрочнения $\chi = \text{const}$ параметр $b = \text{const}$. В тоже время следует иметь в виду следующие детали. В рамках допущения об однородной и изотропной упругости соотношение (33) распространяется и на обратимую область ($\varepsilon = e, \bar{\varepsilon} = \bar{e}$), в которой численное значение параметра b не влияет на поведение модели: $\bar{e}_{ij} - e_{ij} = b(\varepsilon_{ij} - \bar{\varepsilon}_{ij})$, $(\bar{e}_{ij} - e_{ij})(1 - b) = 0$, $\bar{e}_{ij} = e_{ij}$.

Таким образом, поразительно простая формула (15) для экстремума несоответствия мер, свидетельствует о независимости внутреннего параметра $b = \sqrt{\chi}$ от накопленной деформации (при $\chi = \text{const}$). Это важное заключение значительно упрощает построение

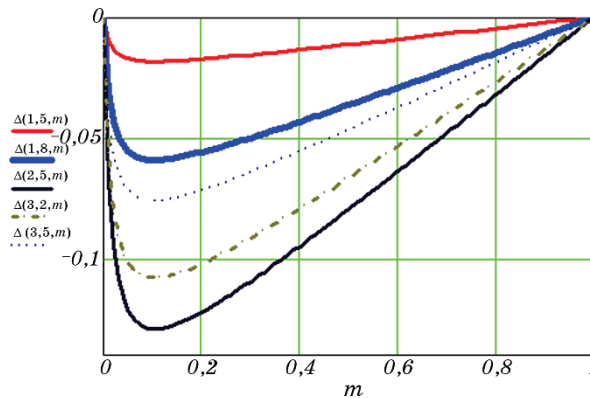


Рис. 2. Закономерности изменения несоответствия мер при различных значениях e .

Fig. 2. Regularities of changes of irrelevance at different e values.

определяющих макроскопических уравнений на основе термомеханических свойств подэлементов. Оно не согласуется с анализом Бервейе–Зауи [3], из которого следует, что параметр b становится зависимым от макроскопической пластической деформации таким образом, что он быстро уменьшается, начиная от 1 до значений меньших на один-два порядка величины ($b = 0,1$ или $0,01$).

Отметим, что на основе принципа экстремума несоответствия мер параметр b становится зависящим от макроскопической деформации только при отказе от предположения об однородной и изотропной упругости. Анализу усложнённого варианта модели будет посвящена отдельная публикация.

6. ВЫВОДЫ

1. Проанализировано уравнение связи в микро- и макросостоянии, применяемое для многоэлементных моделей, которые отражают неоднородность протекания процессов деформирования и нагружения в макроскопическом однородном элементе тела.
2. Подход Крёнера (предполагает, что каждое зерно последовательно рассматривается как включение в «матрицу» всех других зёрен) приводит к очень удобному «априорному» закону взаимодействия, который легко выводится из решения задачи включения, полученного Эшелби в 1957 г.
3. Согласно трём уравнениям Р. Хилла, удовлетворяющим уравнениям равновесия и геометрическим соотношениям, результаты усреднения по объёму напряжений, деформаций и их произведений совпадают с соответствующими макроскопическими значениями. К недостаткам законов взаимодействия Крёнера следует отнести несогласованность с третьим уравнением Хилла и с первым законом термодинамики.
4. В подходе, предложенном Марина, используется и третье соотношение Хилла. При этом взаимосвязь между флуктуациями девиаторов напряжений и деформаций линейна как в подходе Крёнера и нелинейна по отношению к флуктуациям шаровых величин. Уточнение неизвестных параметров производится на основе предложенного принципа экстремума несоответствия макроскопических мер (которые зависят не только от данных на поверхности конгломерата, но и от его структур) с соответствующими усреднёнными значениями микроскопических аналогов.
5. Установлено, что теоретический макроскопический модуль сдвига в модели Крёнера для любого поликристаллического материала больше или равен модулю сдвига в модели Марина.
6. Указано, что в рамках допущения об однородной изотропной упругости материальных частиц, имеющих различные термореологические свойства в необратимой области деформирования, коэф-

коэффициент пропорциональности между флуктуациями напряжения и деформации примерно на один порядок меньше, чем в модели Крöнера.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. R. Hill, *Proc. Phys. Society, Section A*, **65**, Iss. 5: 349 (1952).
2. E. Kröner, *Int. J. Engng. Sci.*, **1**: 261 (1963).
3. M. Berveiller and A. Zaoui, *J. Mechanics Phys. Solids*, **26**: 325 (1979).
4. В. Ю. Марина, *Многоэлементная модель среды, описывающая переменные сложные неизотермические процессы нагружения* (Автореферат диссертации ... д-ра физ.-мат. наук) (Киев: Институт механики НАН Украины: 1991).
5. В. Ю. Марина, *Прикладная механика*, № 6: 9 (1997).
6. В. Ю. Марина, *Известия АН Молдовы. Серия математика*, № 2: 16 (1998).
7. В. Ю. Марина, В. И. Марина, *Металлофиз. новейшие технол.*, **39**, № 3: 387 (2017).
8. М. Онами, С. Ивасимидзу, К. Гэнка, К. Сиодзава, К. Танака, *Введение в микромеханику* (Ред. М. Онами) (Москва: Металлургия: 1987).
9. Т. Д. Шермергор, *Теория упругости микронеоднородных сред* (Москва: Наука: 1977).
10. Д. А. Гохфельд, О. С. Садаков, *Пластичность и ползучесть элементов конструкции при повторных нагружениях* (Москва: Машиностроение: 1984).

REFERENCES

1. R. Hill, *Proc. Phys. Society, Section A*, **65**, Iss. 5: 349 (1952).
2. E. Kröner, *Int. J. Engng. Sci.*, **1**: 261 (1963).
3. M. Berveiller and A. Zaoui, *J. Mechanics Phys. Solids*, **26**: 325 (1979).
4. V. Marina, *Mnogoelementnaya Model Sredy Opisivaiyuschaya Peremennye Slozhnye Neizotermicheskie Protsessy Nagruzheniya* (Thesis of Disser. for Dr. Phys.-Math. Sci.) (Kyiv: Institute of Mechanics N.A.S.U.: 1991) (in Russian).
5. V. Marina, *Prikladnaya Mekhanika*, No. 6: 9 (1997) (in Russian).
6. V. Marina, *Izvestiya AN Moldovy. Seriya Matematika*, No. 2: 16 (1998) (in Russian).
7. V. Yu. Marina and V. I. Marina, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **39**, No. 3: 387 (2017) (in Russian).
8. M. Onami, S. Ivasimidzu, K. Ganka, K. Siodzava, and K. Tanaka, *Vvedenie v Micromekhaniku* (Ed. M. Onami) (Moscow: Metallurgiya: 1987) (in Russian).
9. T. D. Sherergor, *Teoriya Uprugosti Microneodnorodnykh Sred* (Moscow: Nauka: 1977) (in Russian).
10. D. A. Gohfelid and O. S. Sadakov, *Plastichnost i Polzuchest Elementov Konstruktsii pri Povtornykh Nagruzheniyakh* (Moscow: Mashinostroenie: 1984) (in Russian).