Прикладная математика и механика. Том 38, 1974

УДК 539.4

КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ФУНКЦИИ УПРУГОГО ПОЛЯ МНОГОФАЗНЫХ ПОЛИКРИСТАЛЛОВ

А. Г. Фокин, Т. Д. Шермергор

(Москва)

Для вычисления корреляционных функций упругого поля микронеоднородных сред предлагается приближение однородности линейной комбинации напряжений и деформаций $\boldsymbol{\sigma} + \mathbf{b}\boldsymbol{\varepsilon} = \mathrm{const}$. Это приближение является обобщением гипотез Фойгта и Ройсса, согласно которым считаются однородными соответственно деформации ε и напряжения σ. В рамках принятого приближения имеет место независимость пространственных флуктуаций объемных и сдвиговых составляющих упругого поля. Показано, что для слоистых материалов предлагаемое соотношение выполняется точно, а для волокнистых и зернистых — приближенно. Найден явный вид тензора $\mathbf{b}$ в сингулярном приближении теории случайных функций в предположении изотропии свойств каждой из фаз волокнистого и зернистого материалов и вычислены корреляционные функции и дисперсии полей напряжений и деформаций. Показано, что в этом приближении координатная и тензорная зависимости корреляционных функций полей напряжений и деформаций разделяются. Для многофазных поликристаллов аналогичный расчет выполнен в корреляционном приближении, согласно которому принимаются во внимание корреляционные функции модулей упругости не выше второго порядка. В этом приближении координатная и тензорная зависимости корреляционных функций упругого поля не разделяются. Найдены условия, при которых корреляционное приближение приводит к независимости объемной и сдвиговой составляющих флуктуаций упругого поля.

При деформировании микронеоднородных сред (композиционных материалов, одно- и многофазных поликристаллов и др.) точный расчет полей напряжений и деформаций представляет собой сложную задачу. Трудность обусловлена необходимостью учета взаимодействия между всеми элементами неоднородности, что сводится к вычислению многократных интегралов от некоторых функций, включающих в себя многоточечные корреляционные или структурные функции. Для преодоления этой трудности могут быть использованы различные приближенные методы. Простейшие из них были предложены Фойгтом [1] и Ройссом [2] в связи с проблемой вычисления эффективных модулей упругости поликристаллов. Согласно этим гипотезам, принимается, что имеет место однородность напряжений (приближение Ройсса) $\sigma = \langle\sigma\rangle = \mathrm{const}$ или деформаций (приближение Фойгта) $\varepsilon = \langle\varepsilon\rangle = \mathrm{const}$. Здесь угловыми скобками обозначено статистическое усреднение по ансамблю однотипных ситуаций, а σ и ε — тензоры второго ранга.

Авторами было предложено [3] сингулярное приближение метода перенормировок, эквивалентное гипотезе [4] о сильной изотропии. В этом приближении учитываются лишь сингулярные составляющие вторых производных тензора Грина уравнения равновесия, что означает «размазывание» упругого поля по зерну неоднородности. С другой стороны, приближение однородного в пределах фазы поля является основным в вариационном методе вычисления эффективных модулей упругости. В неявном виде такой подход принят в методе самосогласования [5].

1. Обобщим приближение Фойгта и Ройсса, потребовав однородности некоторой комбинации полей напряжений и деформаций

$$\boldsymbol{\sigma} + \mathbf{b}\boldsymbol{\varepsilon} = \langle \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{b}\boldsymbol{\varepsilon}\rangle = \mathrm{const} \tag{1.1}$$

Из выражения (1.1) следует

(1.2) $$\sigma' = -\mathbf{b}\varepsilon', \quad \varepsilon' = -\mathbf{a}\sigma', \quad \mathbf{ab} = \mathbf{I} \quad (\mathbf{x}' \equiv \mathbf{x} - \langle\mathbf{x}\rangle)$$

т. е. случайные составляющие полей напряжений и деформаций связаны между собой при помощи некоторого постоянного тензора четвертого ранга **b** или обратного ему тензора **a**. Здесь **I** — единичный тензор четвертого ранга.

Соотношение, аналогичное (1.2), было предложено в качестве гипотезы [5, 6] для вычисления эффективных модулей упругости однофазных поликристаллов кубической симметрии. Оно использовалось также [7] для построения теории пластичности поликристаллов.

В рамках приближения (1.2) можно найти связь между многоточечными корреляционными функциями полей напряжений и деформаций

(1.3) $$\langle\sigma'(\mathbf{r}_1)\otimes\sigma'(\mathbf{r}_2)\otimes\ldots\otimes\sigma'(\mathbf{r}_n)\rangle = (-1)^n\langle\mathbf{b}\varepsilon'(\mathbf{r}_1)\otimes\mathbf{b}\varepsilon'(\mathbf{r}_2)\otimes\ldots\otimes\mathbf{b}\varepsilon'(\mathbf{r}_n)\rangle$$

или между одноточечными моментами

(1.4) $$\langle[\sigma'(\mathbf{r}_1)\otimes]^n\rangle = (-1)^n\langle[\mathbf{b}\varepsilon'(\mathbf{r}_1)\otimes]^n\rangle$$

Здесь и далее $\mathbf{A}\otimes\mathbf{B}$ означает прямое произведение, ранг которого равен сумме рангов сомножителей, **AB** — произведение, в котором проводится свертка внутренних индексов. Ранг такого произведения равен разности рангов сомножителей, если ранги **A** и **B** не совпадают, и рангу одного из сомножителей в противоположном случае. Наконец, $\mathbf{A}\cdot\mathbf{B}$ будет означать произведение с полной сверткой всех индексов, преобразующие два тензора одинакового ранга в скаляр.

Отметим, что для слоистых материалов, составленных из произвольных анизотропных компонентов, соотношения (1.1) и (1.2) выполняются точно, что вытекает из условия

(1.5) $$\varepsilon_{\alpha\beta} = \langle\varepsilon_{\alpha\beta}\rangle, \quad \sigma_{i3} = \langle\sigma_{i3}\rangle, \quad \alpha, \beta = 1, 2$$

Отсюда $b_{i3kl} = 0$ и $a_{\alpha\beta kl} = 0$, т. е. одни компоненты тензора **b** обращаются в нуль, а другие — в бесконечность. Здесь ось x_3 направлена ортогонально слоям. Если же материал имеет произвольную структуру, то соотношения (1.1) и (1.2) выполняются лишь приближенно.

Для зернистой среды, представляющей собой квазиизотропную смесь анизотропных или изотропных компонентов в сингулярном приближении, соотношения (1.1) и (1.2) выполняются, а тензор **b** равен [8]

(1.6) $$\mathbf{b}^c = 3b_K{}^c\mathbf{V} + 2b_\mu{}^c\mathbf{D}, \quad \mathbf{V}+\mathbf{D} \equiv \mathbf{I}, \quad 3b_K{}^c = 4\mu_c$$
$$6b_\mu{}^c = \mu_c\,\frac{9K_c + 8\mu_c}{K_c + 2\mu_c}$$

где **V** и **D** — объемная и девиаторная составляющие единичного тензора **I**, а индексами c отмечено, что данные величины относятся к однородному телу сравнения, которое для нетекстурированных зернистых сред изотропно. Вычисление постоянных упругости тела сравнения по известным постоянным упругости компонентов может быть выполнено, например, методом, предложенным в [9].

Аналогично для волокнистых материалов находим

$$a_{11}+a_{12}=\frac{1}{2}a_{44}=\frac{1}{2\mu_c},\quad 2(a_{11}-a_{12})=a_{66}=\frac{1}{\mu_c}\frac{3K_c+7\mu_c}{3K_c+\mu_c} \tag{1.7}$$
$$a_{13}=a_{33}=0$$

Таким образом, в сингулярном приближении как для зернистых, так и для волокнистых структур соотношения (1.1) и (1.2) выполняются.

2. При помощи соотношений (1.3) по известным тензорам $\mathbf{a}$ и $\mathbf{b}$ могут быть вычислены связи между корреляционными функциями напряжений и деформаций. Если тензор $\mathbf{b}$ дается соотношением (1.6), то бинарные корреляционные функции напряжений и деформаций будут иметь вид

$$S_{ijkl}(r)=D^{q}_{ijkl}\varphi(\mathbf{r}),\qquad E_{ijkl}(r)=D^{p}_{ijkl}\varphi(\mathbf{r}) \tag{2.1}$$
$$D^{x}_{ijkl}\equiv(x_{ij}-\langle x_{ij}\rangle)(x_{kl}-\langle x_{kl}\rangle)$$

$$q_{ij}\equiv\frac{b_K{}^cK'\varepsilon}{K_c+b_K{}^c}\delta_{ij}+\frac{2b_\mu{}^c\mu'}{\mu_c+b_\mu{}^c}e_{ij} \tag{2.2}$$
$$p_{ij}\equiv\frac{K'\varepsilon}{3(K_c+b_K{}^c)}\delta_{ij}+\frac{\mu'}{\mu_c+b_\mu{}^c}e_{ij}$$

Соотношения (2.1) можно рассматривать как параметрическую форму связи функций S_{ijkl} и E_{ijkl}.

Отсюда для среднеквадратичных флуктуаций объемных и сдвиговых напряжений и деформаций находим

$$\sigma_*=3b_K{}^c\varepsilon_*,\qquad s_*=2b_\mu{}^ce_* \tag{2.3}$$
$$\sigma_*\equiv3\mathbf{S}\cdot\mathbf{V},\quad \varepsilon_*{}^2\equiv3\mathbf{E}\cdot\mathbf{V},\quad s_*{}^2\equiv\mathbf{D}\cdot\mathbf{S},\quad e_*{}^2\equiv\mathbf{D}\cdot\mathbf{E} \tag{2.4}$$

Видно, что связи $\sigma_*-\varepsilon_*$ и s_*-e_* по форме аналогичны закону Гука для объемной и девиаторной составляющих напряжений и деформаций. Таким образом, в сингулярном приближении имеет место независимость объемных и сдвиговых флуктуаций полей напряжений и деформаций зернистой среды.

3. В сингулярном приближении упругое поле в пределах элемента неоднородности считается однородным. Поэтому в сингулярном приближении нельзя описывать такие виды деформации зерен как изгибы и искривления. В этой связи представляет интерес вернуться к корреляционному приближению, которое хотя и приводит к более широкой вилке для эффективных модулей упругости, обладает тем преимуществом, что здесь не предполагается однородность поля в пределах данного зерна.

Корреляционное приближение использовалось для вычисления связей между среднеквадратичными флуктуациями полей напряжений и деформаций при изотропном макродеформировании в работе [10]. Общий случай применительно к композициям из изотропных фаз был рассмотрен в [11].

Ниже приводится соответствующий расчет для многофазных поликристаллов в корреляционном приближении. В этом приближении координатная и тензорная зависимости корреляционных функций упругих полей не разделяются.

Проводя вычисления аналогично тому, как это было сделано ранее [11], получим

(3.1) $$\mu_c^2 E_{ijkl}(\mathbf{r}) = Q_{kl}^{ij}[\delta_{ip}\delta_{kq}J_{jlrs} + 2\varkappa\delta_{ip}J_{jklqrs} + \varkappa^2 J_{ijklpqrs}]D_{prqs}^{\lambda}$$

(3.2) $$S_{ijkl}(\mathbf{r}) = Q_{kl}^{ij}[D_{ijkl}^{\lambda}\varphi + 2\lambda_{ijpq}^{c}\mu_c^{-1}(D_{klpr}^{\lambda}J_{qr} + \varkappa D_{klrs}^{\lambda}J_{pqrs}) + \lambda_{ijpq}^{c}\lambda_{klrs}^{c}E_{pqrs}]$$

$$\lambda_{ij} \equiv \lambda_{ijkl}\langle\varepsilon_{kl}\rangle, \qquad \varkappa \equiv \frac{3K_c + \mu_c}{3K_c + 4\mu_c}$$

Здесь величины D_{ijkl}^{α} даются выражением (2.2), а оператор перестановки $Q_{kl}{}^{ij}$ и тензор $J_{ij\ldots}$ определены в [11]. При $r = 0$ выражения (3.1) дают центральные моменты второго порядка тензоров деформаций и напряжений. Соответствующие выражения могут быть представлены в виде

(3.3) $$15\mu_c^2 \mathring{E}_{ijkl} = {}^1/_{63}\,\varkappa^2\Lambda\delta_{ijkl} - {}^1/_7\,\varkappa(1 - {}^4/_9\,\varkappa)\Lambda_{1ijkl}^{2} + (1 - {}^4/_7\,\varkappa + {}^8/_{63}\,\varkappa^2)\Lambda_{ijkl} + Q_{kl}^{ij}(\delta_{ik}\Lambda_{jplp} - \Lambda_{ikjl})$$

(3.4) $$15\mathring{S}_{ijkl} = 60\mu_c^2\mathring{E}_{ijkl} + (1 - 2\varkappa)(1 - {}^{10}/_7\,\varkappa)\Lambda\delta_{ij}\delta_{kl} + (8\varkappa - 5)(D_{ijkl}^{\lambda} - 2\delta_{[ij}D_{kl]pp}^{\lambda}) + 4(2\varkappa - 1)(1 - {}^4/_7\,\varkappa)\delta_{[ij}\Lambda_{kl]}$$

(3.5) $$\Lambda_{ijkl} \equiv D_{ijkl}^{\lambda} + D_{ikjl}^{\lambda} + D_{iljk}^{\lambda}; \quad \Lambda \equiv \Lambda_{iikk} = D_{iikk}^{\lambda} + 2D_{ikik}^{\lambda}$$

$$\Lambda_{1ijkl}^{(2)} \equiv \sum_{P}\delta_{ij}\Lambda_{kl}, \qquad \Lambda_{kl} \equiv \Lambda_{iikl}$$

В выражении (3.5) суммирование проводится по всем нетождественным перестановкам индексов, т. е. величина $\Lambda_{1ijkl}^{(2)}$ содержит шесть слагаемых. Квадратными скобками обозначена операция симметризации по парам индексов.

Из выражений (3.3) и (3.4) можно найти объемные и девиаторные свертки центральных моментов второго порядка. Вводя при помощи соотношений (2.4) функции σ_*, s_*, ε_* и e_*, получим

(3.6) $$15\mu_c^2\varepsilon_*^2 = (1 - \varkappa)^2\Lambda$$

$$45\mu_c^2 e_*^2 = 2(1 - \varkappa)^2\Lambda + {}^3/_2(3D_{pqpq}^{\lambda} - D_{ppqq}^{\lambda})$$

$$15\sigma_*^2 = (4\varkappa - 1)^2\Lambda + 5(5 - 8\varkappa)D_{iikk}^{\lambda}$$

$$45s_*^2 = 8(1 - \varkappa)^2\Lambda + (8\varkappa + 1)(3D_{pqpq}^{\lambda} - D_{ppqq}^{\lambda})$$

Из равенств (3.6) следует, что каждая из четырех искомых величин выражается через две свертки D_{pqpq}^{λ} и D_{ppqq}^{λ}. Исключая их, находим связь между дисперсиями напряжений и деформаций

(3.7) $$\sigma_*^2 = 4\mu_c^2[{}^2/_3(11 - 8\varkappa)\varepsilon_*^2 + (8\varkappa - 5)e_*^2]$$

$$s_*^2 = {}^4/_9\,\mu_c^2[(5 - 8\varkappa)\varepsilon_*^2 + {}^3/_2(8\varkappa + 1)e_*^2]$$

Согласно равенству (1.2), объемные и сдвиговые составляющие флуктуации полей напряжений и деформаций должны быть независимы. Из соотношений (3.7) видно, что отмеченная независимость будет лишь при выполнении условия $3K_c = 4\mu_c$, т. е. при $\varkappa = {}^5/_8$. В этом частном случае

(3.8) $$\sigma_* = 4\mu_c\varepsilon_*, \qquad s_* = 2\mu_c e_*$$

Равенства (3.8) совпадают с (2.3), поскольку согласно (1.6), $b_K{}^c = {}^4/_3\,\mu_c$, а при $\varkappa = {}^5/_8$ величина $b_\mu{}^c = \mu_c$.

Таким образом, в корреляционном приближении соотношения (1.1) и (1.2) выполняются лишь для $K_c = {}^4/_3\,\mu_c$. При произвольном соотношении между объемным и сдвиговым модулями материала флуктуация объемной составляющей поля напряжений выражается не только через флуктуацию объемных деформаций, но и через флуктуацию сдвиговых деформаций| и наоборот.

Сравнивая корреляционное и сингулярное приближения отметим, что эффективные модули упругости, вычисленные при помощи сингулярного приближения, оказываются ближе к их точному значению, чем при использовании корреляционного приближения. С другой стороны, сингулярное приближение, как уже отмечалось, обладает тем недостатком, что не позволяет рассчитывать повороты зерен.

Действительно, корреляционный тензор углов поворотов зерен определяется выражением $\Omega_{ij} = -{}^1/_4 e_{ipq} e_{jrs} U_{pr,qs}$.

Тензор дисторсии в сингулярном приближении равен [8]

$$u_{i,j} = u^c_{i,j} + G_{ik,jl} * \lambda'_{klpq} \varepsilon_{pq}$$

Здесь $u_{i,j}{}^c$ — тензор| дисторсии поля сравнения, G_{ik} — тензор Грина уравнения равновесия, e_{ipq} — единичный антисимметричный тензор Леви-Чивита.

В сингулярном приближении имеем [3]

$$G^s_{ik,jl} = -\frac{1}{3\mu^c}\left[\delta_{ik}\delta_{ej} - \frac{\varkappa}{5}\delta_{ijkl}\right]\delta(\mathbf{r})$$

Отсюда видно, что свертка тензора $G^s_{ik,jl}$ с тензором $\lambda'_{klpq}\varepsilon_{pq}$, симметричным относительно индексов kl, дает тензор, симметричный по индексам ij. Следовательно, вектор углов поворота $\omega_i = -{}^1/_2\, e_{ijk} u_{j,k}$ может быть отличен от нуля лишь за счет поля сравнения $u_{i,j}$, которое всегда регулярное. Поэтому центральная моментная функция вектора угла поворота Ω_{ij} обращается в нуль. В то же время в корреляционном приближении $\Omega_{ij} \neq 0$ за исключением чисто объемного макродеформирования, когда $\langle\varepsilon_{ij}\rangle = {}^1/_3 \langle\varepsilon\rangle\delta_{ij}$.

При использовании высших приближений теории случайных функций величина $\mathbf{b}$ в уравнениях (1.1) и (1.2) уже не будет постоянным тензором, а оказывается матричным интегральным оператором, кратность которого определяется принятым приближением. Очевидно, в этом случае приближение однородности некоторой комбинации полей напряжений и деформаций теряет смысл.

Поступила 6 VII 1973

ЛИТЕРАТУРА

1. *Voigt W.* Lihrbuch der Kristallphysik. Berlin, 1928.
2. *Reuss A.* Berechnung der Fliebgrenze von Mischkristallen auf Grund der Plastizitäsbedinnung für Einkristalle. Z. Angew. Math. und Mech., 1929, Bd 9, № 49.
3. *Фокин А. Г., Шермергор Т. Д.* Вычисление эффективных упругих модулей композиционных материалов с учетом многочастичных взаимодействий. ПМТФ, 1969, № 1.
4. *Болотин В. В., Москаленко В. Н.* Макроскопические характеристики микронеоднородных твердых тел. ДАН СССР, 1968, т. 178, № 3.
5. *Hershey A. V.* The elasticity of an isotropic aggregate of anisotropic cubic crystal. J. Appl. Mech., 1954, vol. 21, No 3.
6. *Kröner E.* Zur plastichen Verformung der Viekristalls. Acta Metallurgica, 1961, vol 9, p. 155.
7. *Кадашевич Ю. И., Новожилов В. В.* О влиянии начальных микронапряжений на макроскопическую деформацию поликристаллов. ПММ, 1968, т. 32, вып. 5.
8. *Фокин А. Г.* Об использовании сингулярного приближения при решении задач статистической теории упругости. ПМТФ, 1972, № 1.
9. *Hashin Z, Shtrikman S.* A variational approach on the theory of the elastic behaviour of multiphase materials. J. Mech. Phys. Solids, 1963, vol. 11, № 2.
10. *Фокин А. Г., Шермергор Т. Д.* Корреляционные функции упругого поля квазиизотропных твердых тел. ПММ, 1968, т. 32, вып. 4.
11. *Фокин А. Г., Шермергор Т. Д.* Корреляционные функции упругого поля квазиизотропных композиционных материалов при неизотропном деформировании. ПММ, 1973, т. 37, вып. 2.