УДК 539.3+536.2

Г. Н. Кувыркин, И. С. Родикова

ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПОВЕДЕНИЯ МЕТАЛЛОВ И СПЛАВОВ В ЗОНЕ ФАЗОВОГО ПРЕВРАЩЕНИЯ*

Исходя из соотношений рациональной термодинамики необратимых процессов для сплошной среды с внутренним параметром состояния предложена термомеханическая модель поведения металлов и сплавов в зоне фазового перехода. Предложена схема определения упругих свойств на основе двойственной вариационной формулировки задачи.

Один из возможных видов фазовых превращений в металлах и сплавах происходит путем совместного смещения атомов, напоминающим процесс сдвига [1], например фазовое превращение в церии, когда одна из его модификаций с кубической структурой при изменении температуры переходит в аналогичную, но с другим параметром элементарной ячейки. Изменение температуры в противоположном направлении приводит к обратному превращению. Обратимое фазовое превращение кобальта сводится к преобразованию гранецентрированной кубической решетки (устойчивой при высоких температурах) в гексагональную плотноупакованную (устойчивую при низких температурах), элементарная ячейка которой представляет собой шестигранную призму [2]. Фазовые превращения такого вида характерны для сплавов с эффектом памяти формы, обнаруженном в сплавах титан–никель, медь–алюминий и других [2–4]. Устойчивую высокотемпературную фазу называют *аустенитом*, низкотемпературную — *мартенситом*. Полагают, что фазовое превращение аустенита в мартенсит начинается при температуре M_s (индекс "s" происходит от англ. слова *start*) и заканчивается при температуре M_f (индекс "f" — от англ. слова *finish*). Обратный переход (мартенсита в аустенит) начинается при температуре A_s и заканчивается при температуре A_f. В общем случае $A_f > M_s > A_s > M_f$ и $M_s - M_f \neq A_f - A_s$. В связи с трудностями определения последних небольших количеств остаточного мартенсита температура A_f соответствует объемной доле мартенсита в сплаве,

*Работа выполнена при поддержке программы "Университеты России" (проект УР 03.01.139) и РФФИ (проект № 05-01-00596).

равной 0,01, а температура M_f — объемной доле аустенита в сплаве, равной 0,01 [1].

При построении термомеханической модели поведения металлов и сплавов в зоне фазовых превращений будем исходить из соотношений рациональной термодинамики необратимых процессов для сплошной среды с внутренними параметрами состояния [5–7]. В качестве единственного внутреннего параметра примем объемную долю $\chi \in [0,\,1]$ мартенсита в сплаве.

Положим, что состояние рассматриваемой сплошной среды в окрестности любой материальной точки определяется четырьмя термодинамическими функциями — активными переменными: массовыми плотностями свободной энергии A и энтропии h, тензором напряжений с компонентами $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$, $i, j = 1, 2, 3$, и вектором плотности теплового потока с компонентами q_i. Аргументами этих функций примем следующие реактивные переменные: тензор малой деформации с компонентами $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}$, абсолютную температуру T, градиент абсолютной температуры с компонентами $\vartheta_k = \partial T/\partial x_k$, где x_k, $k = 1, 2, 3$, — декартовы прямоугольные координаты, и внутренний параметр состояния χ.

Тогда

$$\begin{gathered} A = A(\varepsilon_{kl}, T, \vartheta_k, \chi), \quad h = h(\varepsilon_{kl}, T, \vartheta_k, \chi), \\ \sigma_{ij} = \sigma_{ij}(\varepsilon_{kl}, T, \vartheta_k, \chi), \quad q_i = q_i(\varepsilon_{kl}, T, \vartheta_k, \chi), \quad i, j, k, l = 1, 2, 3. \end{gathered} \tag{1}$$

Для определения внутреннего параметра состояния χ должно быть задано кинетическое уравнение

$$\dot{\chi} = \kappa\left(\varepsilon_{kl}, T, \vartheta_k, \chi\right),$$

где $\dot{\chi} = \partial \chi/\partial t$, t — время. Вид кинетического уравнения и его влияние на характер фазового превращения рассмотрен в работе [8].

Закон сохранения энергии в данном случае имеет вид

$$\rho \dot{u} = \sigma_{ij} \dot{\varepsilon}_{ij} - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \rho r, \tag{2}$$

где ρ — плотность, которая принята неизменной в процессе фазовых превращений; u — массовая плотность внутренней энергии; r — массовая плотность мощности источников энерговыделения. Здесь и далее в формулах полагаем суммирование по повторяющимся индексам. Второй закон термодинамики (неравенство Клаузиуса–Дюгема) для простого термомеханического процесса имеет вид

$$\rho \dot{h} + \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{q_i}{T}\right) - \frac{\rho r}{T} \geq 0. \tag{3}$$

Воспользовавшись преобразованием Лежандра $u = A + Th$, получим другую форму записи закона сохранения энергии:

$$\rho\frac{\partial A}{\partial\varepsilon_{ij}}\dot{\varepsilon}_{ij} + \rho\frac{\partial A}{\partial T}\dot{T} + \rho\frac{\partial A}{\partial\vartheta_i}\dot{\vartheta}_i +$$

$$+ \rho\frac{\partial A}{\partial\chi}\dot{\chi} + \rho\dot{T}h + \rho T\dot{h} - \sigma_{ij}\dot{\varepsilon}_{ij} + \frac{\partial q_i}{\partial x_i} - \rho r = 0. \quad (4)$$

Продифференцируем далее второе слагаемое в левой части неравенства (3), а затем умножим левую и правую части полученного неравенства на $T > 0$ и вычтем из левой части неравенства левую часть равенства (4):

$$-\left(\rho\frac{\partial A}{\partial\varepsilon_{ij}} - \sigma_{ij}\right)\dot{\varepsilon}_{ij} - \rho\left(\frac{\partial A}{\partial T} + h\right)\dot{T} -$$

$$- \rho\frac{\partial A}{\partial\vartheta_i}\dot{\vartheta}_i - \rho\frac{\partial A}{\partial\chi}\dot{\chi} - \frac{1}{T}\frac{\partial T}{\partial x_i}q_i \geq 0.$$

В силу произвольности $\dot{\varepsilon}_{ij}$, $\dot{T}$ и $\dot{\vartheta}_i$ из последнего неравенства следуют достаточные условия его выполнения:

$$\sigma_{ij} = \rho\frac{\partial A}{\partial\varepsilon_{ij}}, \quad h = -\frac{\partial A}{\partial T}, \quad \frac{\partial A}{\partial\vartheta_i} = 0. \quad (5)$$

Второй закон термодинамики в этом случае приобретает следующий вид:

$$\delta_D - \frac{1}{T}\frac{\partial T}{\partial x_i}q_i \geq 0, \quad (6)$$

где $\delta_D = -\rho\dfrac{\partial A}{\partial\chi}\dot{\chi}$ — диссипативная функция.

Положим далее, что мала не только полная деформация ($\| \varepsilon_{ij} \| \ll 1$, $\| \cdot \|$ — евклидова норма матрицы, составленной из компонентов соответствующего тензора), но и температурная деформация, определенная тензором с компонентами $\varepsilon_{ij}^{(T)} = \varepsilon_{ji}^{(T)}$, и фазовая с компонентами $\varepsilon_{ij}^{(\chi)} = \varepsilon_{ji}^{(\chi)}$. Отметим, что $\varepsilon_{ij}^{(T)} = 0$ при температуре T_0 естественного состояния и $\dot{\varepsilon}_{ij}^{(\chi)} = 0$ при $\dot{\chi} = 0$.

Представим первое соотношение из (1) следующим образом:

$$\rho A(\varepsilon_{kl}, T, \chi) =$$

$$= \frac{1}{2}C_{ijkl}(\varepsilon_{kl} - \varepsilon_{kl}^{(T)} - \varepsilon_{kl}^{(\chi)})(\varepsilon_{ij} - \varepsilon_{ij}^{(T)} - \varepsilon_{ij}^{(\chi)}) + \rho B(T, \chi) +$$

$$+ \rho B_1(\chi) - \frac{1}{2}C_{ijkl}\,(-\varepsilon_{kl}^{(T)} - \varepsilon_{kl}^{(\chi)})(-\varepsilon_{ij}^{(T)} - \varepsilon_{ij}^{(\chi)}), \quad (7)$$

где $C_{ijkl} = C_{jikl} = C_{ijlk} = C_{klij}$ — компоненты тензора коэффициентов упругости, $B(T, \chi)$ — часть свободной энергии единицы массы тела, зависящая от абсолютной температуры и внутреннего параметра состояния, причем $B(T_0, 0) = 0$, а $B_1(\chi)$ — часть свободной энергии единицы массы тела, звависящая только от внутреннего параметра состояния, и $B_1(0) = 0$. Отметим, что при $\varepsilon_{ij} = 0$ из равенства (7) следует, что $\rho A = \rho B + \rho B_1$, т. е. при отсутствии деформации свободная энергия тела зависит только от абсолютной температуры и внутреннего параметра состояния.

Из первого равенства (5) и соотношения (7) следует выражение для компонентов тензора напряжений:

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \left(\varepsilon_{kl} - \varepsilon_{kl}^{(T)} - \varepsilon_{kl}^{(\chi)}\right). \tag{8}$$

Если равенство (8) разрешить относительно компонентов тензора деформации, то

$$\varepsilon_{ij} = B_{ijkl}\sigma_{kl} + \varepsilon_{ij}^{(T)} + \varepsilon_{ij}^{(\chi)}, \tag{9}$$

где B_{ijkl} — копоненты тензора коэффициентов податливости; тензор упругой деформации имеет компоненты $\varepsilon_{ij}^{(e)} = B_{ijkl}\sigma_{kl}$. Для изотропного материала соотношения (8) и (9) можно привести к следующему виду:

$$\begin{gathered} \sigma_{ij} = \left(K - \frac{2}{3}\mu\right)\varepsilon_{kk}\delta_{ij} + 2\mu\varepsilon_{ij} - 3K(\varepsilon^{(T)} + \varepsilon^{(\chi)})\delta_{ij}, \\ \varepsilon_{ij} = \frac{1}{2\mu}\left(\sigma_{ij} - \frac{K - 2\mu/3}{3K}\sigma_{kk}\delta_{ij}\right) + (\varepsilon^{(T)} + \varepsilon^{(\chi)})\delta_{ij}, \end{gathered} \tag{10}$$

где K, μ — модули всестороннего сжатия и сдвига соответственно, δ_{ij} — символ Кронекера.

Закон сохранения энергии (4) с учетом равенств (5) принимает вид

$$-\rho T\frac{\partial^2 B}{\partial T^2}\dot{T} - \rho T\frac{\partial^2 B}{\partial T\partial\chi}\dot{\chi} + TC_{ijkl}\dot{\varepsilon}_{kl}\frac{\partial\varepsilon_{ij}^{(T)}}{\partial T} = -\frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \rho r + \delta_D, \tag{11}$$

где не учитываются слагаемые, содержащие линейную и квадратичную зависимость h и $\dot{h}$ от ε_{ij}, $\varepsilon_{ij}^{(T)}$ и $\varepsilon_{ij}^{(\chi)}$, имеющие более высокий порядок малости по сравнению с оставшимися.

Если положить, что компоненты вектора плотности теплового потока связаны с градиентом температуры законом Фурье:

$$q_i = -\lambda_{ij}^{(T)}\frac{\partial T}{\partial x_j},$$

где $\lambda_{ij}^{(T)} = \lambda_{ij}^{(T)}(T, \chi)$ — компоненты симметричного тензора теплопроводности, то закон сохранения энергии в виде (11) переходит в уравнение теплопроводности

$$\rho c_\varepsilon \dot{T} - \rho m_\varepsilon \dot{\chi} + T C_{ijkl} \dot{\varepsilon}_{kl} \frac{\partial \varepsilon_{ij}^{(T)}}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda_{ij}^{(T)} \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + \rho r + \delta_D, \qquad (12)$$

где $c_\varepsilon = -T\partial^2 B/\partial T^2$ — удельная массовая теплоемкость при постоянной деформации, $m_\varepsilon = T\partial^2 B/(\partial T \partial \chi)$ — удельная массовая конфигурационная теплоемкость [9] при постоянной деформации (количество энергии, затрачиваемой на фазовый переход единицы массы при постоянной деформации). Отметим, что в уравнении (12) второе слагаемое в левой части и последнее слагаемое в правой части отличны от нуля для $t \in [t_s, t_f]$, где t_s, t_f — моменты времени начала и окончания фазового перехода.

В зоне фазового превращения сплавы можно рассматривать как двухкомпонентную смесь переменного состава. Экспериментальное определение термомеханических свойств при этом принципиально невозможно в силу кинетического характера фазового превращения. В этом случае актуальной становится проблема расчетно-теоретической оценки свойств сплавов в зоне фазового превращения. Методам оценки эффективных упругих свойств неоднородных материалов посвящены работы [10–14] и другие, однако в данном случае число подлежащих определению параметров модели превышает число обычно рассматриваемых. Поскольку диапазон температуры, в котором происходят фазовые превращения, обычно не превышает 10…50 K, то в дальнейшем зависимость рассматриваемых термомеханических свойств от температуры не учитывается.

Для средних по объему характерного (представительного) элемента гетерогенного материала, а также для средних по объему этого элемента компонентов тензоров напряжений $\overset{\alpha}{\sigma}_{ij}$ и деформации $\overset{\alpha}{\varepsilon}_{ij}$ имеем

$$\overset{\alpha}{\sigma}_{ij} = \overset{\alpha}{C}_{ijkl} \overset{\alpha}{\varepsilon}_{kl}, \quad \sigma_{ij} = \chi_1 \overset{1}{\sigma}_{ij} + \chi_2 \overset{2}{\sigma}_{ij}, \quad \varepsilon_{ij} = \chi_1 \overset{1}{\varepsilon}_{ij} + \chi_2 \overset{2}{\varepsilon}_{ij}, \qquad (13)$$

где $\alpha = 1, 2$; $\chi_1 = \chi$ — объемная доля мартенсита и $\chi_2 = 1 - \chi$ — объемная доля аустенита; $\overset{\alpha}{C}_{ijkl}$ — компоненты тензора коэффициентов упругости включений (мартенсита) и матрицы (аустенита); σ_{ij}, ε_{ij} — средние значения компонентов тензоров напряжений и деформации в объеме представительного элемента. С помощью соотношений (13) можно установить связи:

$$\overset{\alpha}{\sigma}_{ij} = \overset{\alpha}{A}_{ijkl} \sigma_{kl}, \quad \overset{\alpha}{\varepsilon}_{ij} = \overset{\alpha}{D}_{ijkl} \varepsilon_{kl},$$

$$\chi_1 \overset{1}{A}_{ijkl} + \chi_2 \overset{2}{A}_{ijkl} = I_{ijkl}, \quad \chi_1 \overset{1}{D}_{ijkl} + \chi_2 \overset{2}{D}_{ijkl} = I_{ijkl}, \qquad (14)$$

$$C_{ijkl} = \chi_1 \overset{1}{C}_{ijmn} \overset{1}{D}_{mnkl} + \chi_2 \overset{2}{C}_{ijmn} \overset{2}{D}_{mnkl},$$

$$B_{ijkl} = \chi_1 \overset{1}{B}_{ijmn} \overset{1}{A}_{mnkl} + \chi_2 \overset{2}{B}_{ijmn} \overset{2}{A}_{mnkl},$$

где $I_{ijkl} = \dfrac{1}{2}(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk})$ — компоненты единичного тензора четвертого ранга; B_{ijkl}, $\overset{1}{B}_{ijkl}$, $\overset{2}{B}_{ijkl}$ — компоненты тензоров коэффициентов податливости всего материала, включений и матрицы. Если C_{ijkl} и B_{ijkl} известны, то тензоры с компонентами $\overset{\alpha}{C}_{ijkl}$ и $\overset{\alpha}{B}_{ijkl}$ однозначно определяются из соотношений

$$\begin{gathered}\chi_\alpha \big(\overset{\alpha}{C}_{ijmn} - \overset{\nu}{C}_{ijmn}\big) \overset{\alpha}{D}_{mnkl} = C_{ijkl} - \overset{\nu}{C}_{ijkl},\\ \chi_\alpha \big(\overset{\alpha}{B}_{ijmn} - \overset{\nu}{B}_{ijmn}\big) \overset{\alpha}{A}_{mnkl} = B_{ijkl} - \overset{\nu}{B}_{ijkl}, \quad \alpha, \nu = 1, 2, \quad \alpha \neq \nu.\end{gathered} \tag{15}$$

Умножив первое уравнение (15) на ε_{kl}, а второе — на σ_{kl}, с учетом равенств (14) получим

$$\chi_\alpha \big(\overset{\alpha}{C}_{ijkl} - \overset{\nu}{C}_{ijkl}\big) \overset{\alpha}{\varepsilon}_{kl} = \big(C_{ijkl} - \overset{\nu}{C}_{ijkl}\big) \varepsilon_{kl},$$

$$\chi_\alpha \big(\overset{\alpha}{B}_{ijkl} - \overset{\nu}{B}_{ijkl}\big) \overset{\alpha}{\sigma}_{kl} = \big(B_{ijkl} - \overset{\nu}{B}_{ijkl}\big) \sigma_{kl}.$$

Далее, поскольку

$$C_{ijkl} = \left(K - \frac{2}{3}\mu\right) \delta_{ij}\delta_{kl} + \mu(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}),$$

$$\overset{\alpha}{C}_{ijkl} = \left(K_\alpha - \frac{2}{3}\mu_\alpha\right) \delta_{ij}\delta_{kl} + \mu_\alpha(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}),$$

$$B_{ijkl} = -\frac{\nu}{2\mu(1+\nu)} \delta_{ij}\delta_{kl} + \frac{1}{4\mu}(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}),$$

$$\overset{\alpha}{B}_{ijkl} = -\frac{\nu_\alpha}{2\mu_\alpha(1+\nu_a)} \delta_{ij}\delta_{kl} + \frac{1}{4\mu_\alpha}(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}),$$

ν_α, ν — коэффициенты Пуассона компонентов и материала в целом, то для изотропных материалов имеем

$$\begin{aligned}
&\chi_\alpha \overset{\alpha}{\varepsilon}_{kk} = \frac{K - K_\nu}{K_\alpha - K_\nu} \varepsilon_{kk}, && \chi_\alpha \overset{\alpha}{e}_{ij} = \frac{\mu - \mu_\nu}{\mu_\alpha - \mu_\nu} e_{ij},\\
&\chi_\alpha \overset{\alpha}{\sigma}_{kk} = \frac{K^{-1} - K_\nu^{-1}}{K_\alpha^{-1} - K_\nu^{-1}} \sigma_{kk}, && \chi_\alpha \overset{\alpha}{s}_{ij} = \frac{\mu^{-1} - \mu_\nu^{-1}}{\mu_\alpha^{-1} - \mu_\nu^{-1}} s_{ij},\\
&\overset{\alpha}{e}_{ij} = \overset{\alpha}{\varepsilon}_{ij} - \frac{1}{3} \overset{\alpha}{\varepsilon}_{kk} \delta_{ij}, && \overset{\alpha}{s}_{ij} = \overset{\alpha}{\sigma}_{ij} - \frac{1}{3} \overset{\alpha}{\sigma}_{kk} \delta_{ij}.
\end{aligned} \tag{16}$$

Потенциальная энергия деформации рассматриваемого объема материала в целом имеет вид

$$U[\boldsymbol{u}] = \frac{1}{2}\int\limits_V \sigma_{ij}\varepsilon_{ij}dV = \frac{1}{2}\left(\chi_1\int\limits_V \overset{1}{\sigma}_{ij}\overset{1}{\varepsilon}_{ij}dV + \chi_2\int\limits_V \overset{2}{\sigma}_{ij}\overset{2}{\varepsilon}_{ij}dV + \right.$$

$$\left. +\chi_1\chi_2\int\limits_V \big(\overset{1}{\varepsilon}_{ij} - \overset{2}{\varepsilon}_{ij}\big)\big(\overset{2}{\sigma}_{ij} - \overset{1}{\sigma}_{ij}\big)dV\right) = U_1[\boldsymbol{u}] + U_2[\boldsymbol{u}] + U_{12}[\boldsymbol{u}],$$

где $U_1[\boldsymbol{u}]$, $U_2[\boldsymbol{u}]$ и $U_{12}[\boldsymbol{u}]$ — средние значения потенциальной энергии деформации компонентов материала и потенциальная энергия их взаимодействия. Выразив компоненты тензоров напряжений и деформации через их шаровые и девиаторные составляющие, получим

$$U_{12}[\boldsymbol{u}] = \frac{1}{2}A_\mu\int\limits_V (\mu_V - \mu)(\mu - \mu_R)e_{ij}e_{ij}dV + \\ + \frac{1}{2}A_K\int\limits_V (K_V - K)(K - K_R)\varepsilon_{kk}^2 dV, \quad (17)$$

$$A_\mu = \frac{2\mu_1\mu_2}{\chi_1\chi_2(\mu_1 - \mu_2)^2\mu_R}, \quad A_K = \frac{K_1K_2}{\chi_1\chi_2K_R(K_1 - K_2)^2},$$

$$K_V = \chi_1K_1 + \chi_2K_2, \quad K_R^{-1} = \chi_1K_1^{-1} + \chi_2K_2^{-1},$$

$$\mu_V = \chi_1\mu_1 + \chi_2\mu_2, \quad \mu_R^{-1} = \chi_1\mu_1^{-1} + \chi_2\mu_2^{-1},$$

где K_V, μ_V, K_R, μ_R — оценки упругих свойств по Фойгту и Рейссу.

В том случае, когда эффективные значения K и μ фиксированы, любое изменение эффективных значений σ_{ij} и ε_{ij} приводит к соответствующему изменению средних значений $\overset{\alpha}{\sigma}_{ij}$ и $\overset{\alpha}{\varepsilon}_{ij}$ в компонентах материала. С другой стороны, можно задать вариации средних значений $\overset{\alpha}{u}_i$, $\overset{\alpha}{\sigma}_{ij}$ и $\overset{\alpha}{\varepsilon}_{ij}$, не изменяя эффективные значения переменных u_i, σ_{ij} и ε_{ij}. Это приводит к изменению величины эффективных модулей.

Пусть $\overset{\alpha}{u}_i, \overset{\alpha}{\sigma}_{ij}, \overset{\alpha}{\varepsilon}_{ij}$ — истинные поля вектора перемещения и тензоров напряжений и деформации. Введем возможные поля вектора перемещений $\overset{\alpha*}{u}_i$ такими, что на поверхности рассматриваемого тела $\overset{\alpha*}{u}_i = \overset{\alpha}{u}_i$. Потребуем, чтобы для соответствующих им значений компонентов тензоров деформации выполнялись условия

$$\chi_1\overset{1*}{\varepsilon}_{ij} + \chi_2\overset{2*}{\varepsilon}_{ij} = \varepsilon_{ij}, \quad \chi_1\delta\overset{1}{\varepsilon}_{ij} + \chi_2\delta\overset{2}{\varepsilon}_{ij} = 0, \quad (18)$$

где $\delta\overset{\alpha}{\varepsilon}_{ij} = \overset{\alpha*}{\varepsilon}_{ij} - \overset{\alpha}{\varepsilon}_{ij}$ — вариации компонентов тензоров деформации.

Тогда из соотношений (16) следует

$$\chi_\alpha \overset{\alpha *}{\varepsilon}_{kk} = \frac{K_* - K_\nu}{K_\alpha - K_\nu}\varepsilon_{kk}, \quad \chi_\alpha \overset{\alpha *}{e}_{ij} = \frac{\mu_* - \mu_\nu}{\mu_\alpha - \mu_\nu}e_{ij},$$
$$\chi_\alpha \delta\overset{\alpha}{\varepsilon}_{kk} = \frac{\delta K_*}{K_\alpha - K_\nu}\varepsilon_{kk}, \quad \chi_\alpha \delta\overset{\alpha}{e}_{ij} = \frac{\delta \mu_*}{\mu_\alpha - \mu_\nu}e_{ij}. \tag{19}$$

Если ранее эффективные модули K, μ были постоянными, то величины модулей K_*, μ_* и их вариации $\delta K_*, \delta\mu_*$, как и компоненты тензоров $\overset{\alpha}{e}{}^*_{ij}$, $\overset{\alpha}{\varepsilon}{}^*_{kk}$ и их вариации, являются функциями пространственных координат. Таким образом, реальное тело с фиксированными свойствами заменено телом с переменными упругими свойствами.

Вариационный принцип Лагранжа для данного случая можно записать следующим образом [14]:

$$\frac{1}{2}\int\limits_V \left(K_*\varepsilon_{kk}^2 + 2\mu_* e_{ij}e_{ij}\right)dV \le \frac{\chi_1}{2}\int\limits_V \left(K_1\left(\overset{1}{\varepsilon}_{kk}\right)^2 + 2\mu_1 \overset{1}{e}_{ij}\overset{1}{e}_{ij}\right)dV +$$
$$+\frac{\chi_2}{2}\int\limits_V \left(K_2\left(\overset{2}{\varepsilon}_{kk}\right)^2 + 2\mu_2 \overset{2}{e}_{ij}\overset{2}{e}_{ij}\right)dV + \frac{1}{2}A_K\int\limits_V (K_V - K_*)(K_* - K_R)\varepsilon_{kk}^2 dV +$$
$$+\frac{1}{2}A_\mu\int\limits_V (\mu_V - \mu_*)(\mu_* - \mu_R)e_{ij}e_{ij}dV. \tag{20}$$

Для выполнения неравенства (20) при любых допустимых функциях K_* и μ_* необходимо, чтобы третье и четвертое слагаемые в правой части этого неравенства были положительны, т. е. были бы справедливы неравенства

$$\sum_{\alpha=1}^{2}\chi_\alpha K_\alpha \geqslant K \geqslant \left(\sum_{\alpha=1}^{2}\frac{\chi_\alpha}{K_\alpha}\right)^{-1}, \quad \sum_{\alpha=1}^{2}\chi_\alpha \mu_\alpha \ge \mu \ge \left(\sum_{\alpha=1}^{2}\frac{\chi_\alpha}{\mu_\alpha}\right)^{-1} \tag{21}$$

— границы по Фойгту (верхние) и Рейссу (нижние) [10, 12].

При этом наихудший результат оценок K_* и μ_* сверху соответствует максимуму функционалов

$$U_K[K] = \frac{1}{2}A_K\int\limits_V (K_V - K_*)(K_* - K_R)\varepsilon_{kk}^2 dV,$$

$$U_\mu[\mu] = \frac{1}{2}A_\mu\int\limits_V (\mu_V - \mu_*)(\mu_* - \mu_R)e_{ij}e_{ij}dV.$$

Поскольку $A_K > 0$, $A_\mu > 0$ для любых K и μ, то из условий

$$\delta U_K[K, \delta K] = \frac{1}{2} A_K \int\limits_V (K_V + K_R - 2K_*) \delta K_* \varepsilon_{kk}^2 dV = 0,$$

$$\delta U_\mu[\mu, \delta\mu] = \frac{1}{2} A_\mu \int\limits_V (\mu_V + \mu_R - 2\mu_*) \delta\mu_* e_{ij} e_{ij} dV = 0$$

следуют неравенства

$$K_* \leq \frac{1}{2}(K_V + K_R), \quad \mu_* \leq \frac{1}{2}(\mu_V + \mu_R). \tag{22}$$

Достаточные условия существования максимумов функционалов $U_K[K]$ и $U_\mu[\mu]$ также выполняются:

$$\delta^2 U_K[K, \delta K] = -A_K \int\limits_V (\delta K_*)^2 \varepsilon_{kk}^2 dV < 0,$$

$$\delta^2 U_\mu[\mu, \delta\mu] = -A_\mu \int\limits_V (\delta\mu_*)^2 e_{ij} e_{ij} dV < 0.$$

Используя вариационный принцип Кастильяно и рассуждая аналогично [14], имеем

$$-\frac{1}{2} \int\limits_V \left(\frac{1}{9K_*} \sigma_{kk}^2 + \frac{1}{2\mu_*} s_{ij} s_{ij} \right) dV \geq$$

$$\geq -\frac{\chi_1}{2} \int\limits_V \left(\frac{1}{9K_1} (\overset{1}{\sigma}_{kk})^2 + \frac{1}{2\mu_1} \overset{1}{s}_{ij} \overset{1}{s}_{ij} \right) dV -$$

$$-\frac{\chi_2}{2} \int\limits_V \left(\frac{1}{9K_2} (\overset{2}{\sigma}_{kk})^2 + \frac{1}{2\mu_2} \overset{2}{s}_{ij} \overset{2}{s}_{ij} \right) dV - \frac{1}{18} A_K \int\limits_V \left(\frac{K_V}{K_*} - 1 \right) \times$$

$$\times \left(1 - \frac{K_R}{K_*} \right) \sigma_{kk}^2 dV - \frac{1}{8} A_\mu \int\limits_V \left(\frac{\mu_V}{\mu_*} - 1 \right) \left(1 - \frac{\mu_R}{\mu_*} \right) s_{ij} s_{ij} dV.$$

Очевидно, что теперь должны быть отрицательны функционалы

$$V_K[K] = -\frac{1}{18} A_K \int\limits_V \left(\frac{K_V}{K_*} - 1 \right) \left(1 - \frac{K_R}{K_*} \right) \sigma_{kk}^2 dV,$$

$$V_\mu[\mu] = -\frac{1}{8} A_\mu \int\limits_V \left(\frac{\mu_V}{\mu_*} - 1 \right) \left(1 - \frac{\mu_R}{\mu_*} \right) s_{ij} s_{ij} dV.$$

Условия минимума этих функционалов, из которых следуют наихудшие оценки снизу значений K_* и μ_*, имеют вид

$$\delta V_K[K,\delta K] = -\frac{1}{18}A_K \int\limits_V \frac{1}{K_*^2}\left(K_R\left(\frac{K_V}{K_*}-1\right)-\right.$$

$$\left.-K_V\left(1-\frac{K_R}{K_*}\right)\right)\delta K_* \sigma_{kk}^2 dV = 0,$$

$$\delta V_\mu[\mu,\delta\mu] = -\frac{1}{8}A_\mu \int\limits_V \frac{1}{\mu_*^2}\left(\mu_R\left(\frac{\mu_V}{\mu_*}\right)-\mu_V\left(1-\frac{\mu_R}{\mu_*}\right)\right)\delta\mu_* s_{ij}s_{ij}dV = 0,$$

откуда следуют неравенства

$$K_* \geq \frac{2K_R K_V}{K_V+K_R}, \quad \mu_* \geq \frac{2\mu_R\mu_V}{\mu_V+\mu_R}. \tag{23}$$

Достаточные условия существования минимумов функционалов $V_K[K]$ и $V_\mu[\mu]$ выполняются, так как в окрестности минимальных значений K_* и μ_* из соотношений (23) следуют неравенства $\delta^2 V_K[K,\delta K] > 0$ и $\delta^2 V_\mu[\mu,\delta\mu] > 0$.

Окончательно полученные результаты можно представить в виде неравенств, объединяющих (22) и (23):

$$\frac{1}{2}(K_V+K_R) \geq K_* \geq \frac{2K_R K_V}{K_V+K_R}, \quad \frac{1}{2}(\mu_V+\mu_R) \geq \mu_* \geq \frac{2\mu_R\mu_V}{\mu_V+\mu_R}. \tag{24}$$

Для проверки применимости неравенств (24) при оценке упругих свойств двухкомпонентных сплавов было проведено сравнение известных экспериментальных данных [15] по модулю упругости $E = 9K\mu/(3K+\mu)$ сплава карбида вольфрама ($K_1 = 419$ ГПа, $\mu_1 = 288$ ГПа) и кобальта ($K_2 = 172$ ГПа, $\mu_2 = 79{,}3$ ГПа). На рис. 1 сплошные линии соответствуют верхней и нижней оценкам модуля упругости с использованием неравенств (24), точками отмечены экспериментальные данные. Видно, что диапазон возможного изменения модуля упругости достаточно узок и соответствует экспериментальным данным.

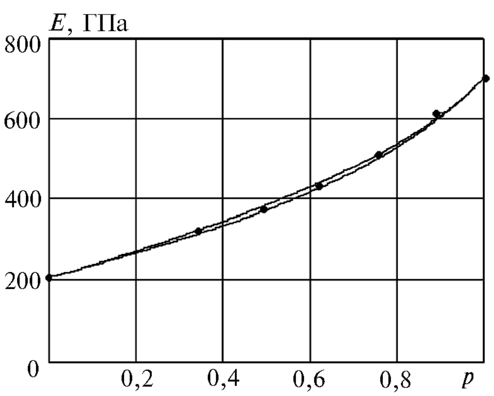

Рис. 1. Модуль Юнга для сплава карбида вольфрама и кобальта

На рис. 2, 3 представлены результаты расчета и границы коэффициентов упругости K и μ

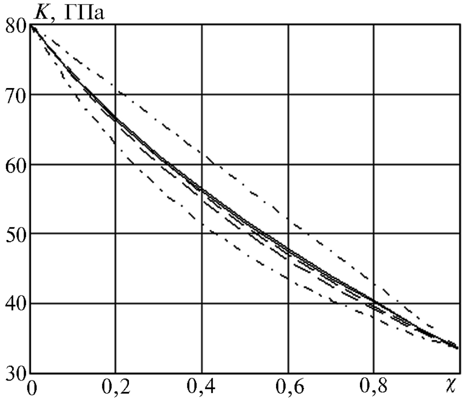

Рис. 2. Верхняя и нижняя оценки модуля всестороннего сжатия никелида титана

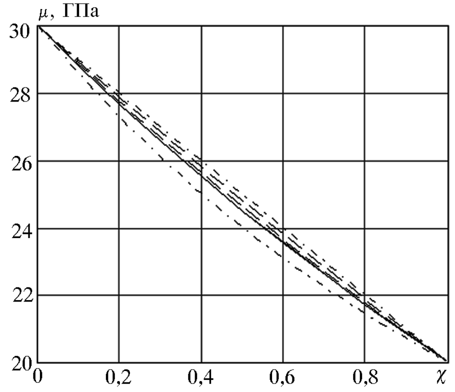

Рис. 3. Верхняя и нижняя оценки модуля сдвига никелида титана

для никелида титана (53,8% Ti) в процессе фазового превращения в зависимости от объемной доли мартенсита по Фойгту и Рейссу (штрихпунктирные линии) и неравенствам (24) (сплошные линии); штриховые линии соответствуют “вилке” Хашина–Штрикмана [10], определяемой неравенствами

$$K_1+\frac{\chi_2(K_2-K_1)}{1+\chi_1 a_1(K_2-K_1)}\geq K\geq K_2+\frac{\chi_1(K_1-K_2)}{1+\chi_2 a_2(K_1-K_2)},\quad K_1>K_2,$$

$$\mu_1+\frac{\chi_2(\mu_2-\mu_1)}{1+\chi_1 b_1(\mu_2-\mu_1)}\geq \mu\geq \mu_2+\frac{\chi_1(\mu_1-\mu_2)}{1+\chi_2 b_2(\mu_1-\mu_2)},\quad \mu_1>\mu_2,$$

где

$$a_\alpha=\frac{3}{3K_\alpha+4\mu_\alpha},\quad b_\alpha=\frac{6(K_\alpha+2\mu_\alpha)}{5\mu_\alpha(3K_\alpha+4\mu_\alpha)},\quad \alpha=1,\,2.$$

Отметим, что границы упругих свойств (24) всегда у́же границ Хашина–Штрикмана и только при близких величинах модулей упругости компонентов области возможных значений эффективных упругих свойств практически совпадают.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ван Флек Л. Теоретическое и прикладное материаловедение: Пер. с англ. – М.: Атомиздат, 1975. — 472 с.
2. Лихачев В. А., Кузьмин С. Л., Каменцева З. П. Эффект памяти формы. – Л.: Изд-во ЛГУ, 1987. – 216 с.
3. Сплавы с эффектом памяти формы: Пер. с японск. / Ооцука К., Симидзу К., Судзуки Ю. и др. – М.: Металлургия, 1990. – 224 с.
4. Абдрахманов С. Деформация материалов с памятью формы при термосиловом воздействии. – Бишкек: Илим, 1991. – 115 с.

5. З а р у б и н В. С., К у в ы р к и н Г. Н. Математические модели термомеханики. – М.: Физматлит, 2002. – 168 с.

6. З а р у б и н В. С., К у в ы р к и н Г. Н. Математическое моделирование термомеханических процессов при интенсивном тепловом воздействии // Теплофизика высоких температур. – 2003. – Т. 43, № 2. – С. 300–309.

7. З а р у б и н В. С., К у в ы р к и н Г. Н. О построении термомеханической модели релаксирующего твердого тела // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. “Естественные науки”. – 2001. – № 2. – С. 23–30.

8. К у в ы р к и н Г. Н., Ф е д у л о в а И. С. Анализ кинетики фазовых переходов в сплавах с эффектом памяти формы // Теплофизика высоких температур. – 2004. – Т. 43, № 1. – С. 121–126.

9. П р и г о ж и н И., К о н д е п у д и Д. Современная термодинамика. От тепловых двигателей до диссипативных структур: Пер. с англ. – М.: Мир, 2002. – 461 с.

10. Ш е р м е р г о р Т. Д. Теория упругости микронеоднородных сред. – М.: Наука, 1977. – 400 с.

11. Б е р д и ч е в с к и й В. Л. Вариационные принципы механики сплошной среды. – М.: Наука, 1983. – 448 с.

12. П о б е д р я Б. Е. Механика композиционных материалов. – М.: Изд-во Моск. ун-та, 1984. – 336 с.

13. З а р у б и н В. С., К у в ы р к и н Г. Н. Прогнозирование теплофизических и термоупругих характеристик композитов // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. “Машиностроение”. – 1994. – № 2. – С. 78–83.

14. Е ф и м е н к о А. В., К у в ы р к и н Г. Н. Новые оценки эффективных упругих модулей двухкомпонентных композитов // Изв. РАН. Мех. твердого тела. – 1994. – № 1. – С. 18–26.

15. З а р у б и н В. С. Прикладные задачи термопрочности элементов конструкций. – М.: Машиностроение, 1985. – 296 с.

Статья поступила в редакцию 19.09.2005

Георгий Николаевич Кувыркин родился в 1946 г, окончил МВТУ им. Н.Э. Баумана в 1970 г. Д-р техн наук, профессор кафедры “Прикладная математика” МГТУ им. Н.Э Баумана.

G. N. Kuvyrkin (b. 1946) graduated from the Bauman Moscow Higher Technical School in 1970. D. Sc. (Eng), professor of “Applied Mathematics” department of the Bauman Moscow State Technical University. Author of 100 publications in the field of thermal mechanics and thermal structural mechanics of construction elements.

Ирина Сергеевна Родикова родилась в 1978 г. Окончила МГТУ им. Н.Э. Баумана в 2001 г. Аспирантка кафедры “Прикладная математика” МГТУ им. Н.Э. Баумана.

I.S. Rodikova (b. 1978) graduated from the Bauman Moscow State Technical University in 2001. Post-graduate of “Applied Mathematics” department of the Bauman Moscow State Technical University.