

Г. Н. К у в ы р к и н   И. С. Р о д и к о в а

## ОЦЕНКА ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МЕТАЛЛОВ И СПЛАВОВ В ЗОНЕ ФАЗОВОГО ПРЕВРАЩЕНИЯ<sup>1</sup>

*Предложена схема определения термомеханических свойств металлов и сплавов в зоне фазового превращения на основе двойственной вариационной формулировки задачи.*

В работе [1] приведены основные соотношения, описывающие фазовые превращения металлов и сплавов, сопровождающиеся изменением характерного размера кристаллической решетки или изменением типа ее симметрии, а также соотношения, позволяющие оценить границы возможного изменения модулей всестороннего сжатия и сдвига в процессе фазового превращения. Данная статья является продолжением работы [1] и посвящена оценке других свойств металлов и сплавов в зоне фазового превращения.

Для оценки теплопроводности металлов и сплавов в зоне фазового превращения положим, что в рассматриваемом гетерогенном материале поле температуры таково, что  $\partial T_\alpha / \partial x_i = \partial T / \partial x_i = \text{const}$ ,  $i = 1, 2, 3$ ,  $\alpha = 1, 2$ , где  $T, T_\alpha$  — абсолютная температура эквивалентной гомогенной среды и  $\alpha$ -го компонента материала. Функционалы, аналогичные функционалам энергии в механике деформируемого твердого тела для неоднородной и однородной сплошной среды, при отсутствии источников объемного тепловыделения имеют вид

$$\begin{aligned}
 I_\alpha[T_\alpha] &= \frac{1}{2} \int_V \chi_\alpha \lambda_{ij}^{\alpha(T)} \frac{\partial T_\alpha}{\partial x_j} \frac{\partial T_\alpha}{\partial x_i} dV - \int_S \tilde{q}_\alpha T_\alpha dS, \\
 I[T] &= \frac{1}{2} \int_V \lambda_{ij}^{(T)} \frac{\partial T}{\partial x_j} \frac{\partial T}{\partial x_i} dV - \int_S \tilde{q} T dS,
 \end{aligned}
 \tag{1}$$

где  $\lambda_{ij}^{\alpha(T)}$ ,  $\lambda_{ij}^{(T)}$  — компоненты тензоров теплопроводности  $\alpha$ -го компонента материала и эквивалентной гомогенной среды;  $\tilde{q}_\alpha, q$  — заданная на граничной поверхности  $S$  тела объемом  $V$  плотность теплового потока для неоднородной и однородной среды соответственно;  $\chi_1, \chi_2$

<sup>1</sup>Работа выполнена при поддержке программы “Университеты России” (проект УР 03.01.139) и РФФИ (проект № 05-01-00596)

— объемные доли мартенсита и аустенита в сплаве в зоне фазового превращения,  $\chi_1 + \chi_2 = 1$ . Положим также, что

$$\sum_{\alpha=1}^2 \int_S \tilde{q}_\alpha T_\alpha dS = \int_S \tilde{q} T dS.$$

Тогда из условий минимума  $\sum_{\alpha=1}^2 I_\alpha[T_\alpha]$  и  $I[T]$  следует неравенство

$$\lambda_{ij}^{(T)} \leq \sum_{\alpha=1}^2 \chi_\alpha \lambda_{ij}^{\alpha(T)}.$$

Если в гетерогенном теле задано поле вектора плотности теплового потока такое, что  $\tilde{q}_i^\alpha = q_i = \text{const}$ ,  $\alpha = 1, 2$ , то двойственные по отношению к выражениям (1) функционалы имеют вид

$$\begin{aligned} J_\alpha[\tilde{\mathbf{q}}] &= -\frac{1}{2} \int_V \chi_\alpha k_{ij}^\alpha \tilde{q}_j^\alpha \tilde{q}_i^\alpha dV - \int_S T_\alpha^{**} \tilde{q}_i^\alpha n_i dS, \\ J[\mathbf{q}] &= -\frac{1}{2} \int_V k_{ij} q_j q_i dV - \int_S T^{**} q_i n_i dS, \end{aligned} \quad (2)$$

где  $k_{ij}^\alpha$ ,  $k_{ij}$  — компоненты тензоров термического сопротивления;  $T_\alpha^{**}$ ,  $T^{**}$  — заданные на граничной поверхности  $S$  значения температуры. Из условий максимума  $\sum_{\alpha=1}^2 J_\alpha[\tilde{\mathbf{q}}]$  и  $J[\mathbf{q}]$  следуют неравенства

$k_{ij} \geq \sum_{\alpha=1}^2 \chi_\alpha k_{ij}^\alpha$ , а так как  $(k_{ij})^{-1} = \lambda_{ij}^{(T)}$ ,  $(k_{ij}^\alpha)^{-1} = \lambda_{ij}^{\alpha(T)}$ , то окончательно

$$\sum_{\alpha=1}^2 \chi_\alpha \lambda_{ij}^{\alpha(T)} \geq \lambda_{ij}^{(T)} \geq \left( \sum_{\alpha=1}^2 \chi_\alpha \left( \lambda_{ij}^{\alpha(T)} \right)^{-1} \right)^{-1}. \quad (3)$$

Для изотропного гомогенного материала и гомогенных компонентов из формулы (3) следуют неравенства

$$\sum_{\alpha=1}^2 \chi_\alpha \lambda_\alpha^{(T)} \geq \lambda^{(T)} \geq \left( \sum_{\alpha=1}^2 \frac{\chi_\alpha}{\lambda_\alpha^{(T)}} \right)^{-1}, \quad (4)$$

в которых  $\lambda_{ij}^{\alpha(T)} = \lambda_\alpha^{(T)} \delta_{ij}$ .

В неравенствах (3) и (4) верхние границы аналогичны соответствующим оценкам по Фойгту, а нижние — по Рейссу в механике. Оценки (3) и (4) компонентов тензора теплопроводности эквивалентной гомогенной среды далеки от свойств реального материала.

Для получения более узких границ значений  $\lambda_{ij}^{(T)}$  рассмотрим двухкомпонентный материал. Для средних по объему представительного элемента гетерогенного материала, а также для средних по объему компонентов материала значений  $\bar{q}_i$ ,  $\partial T_\alpha / \partial x_i$  справедливы соотношения

$$\bar{q}_i = -\lambda_{ij}^{(\alpha)} \frac{\partial T_\alpha}{\partial x_i}, \quad q_i = \chi_1 \bar{q}_i^1 + \chi_2 \bar{q}_i^2, \quad \frac{\partial T}{\partial x_i} = \chi_1 \frac{\partial T_1}{\partial x_i} + \chi_2 \frac{\partial T_2}{\partial x_i}, \quad (5)$$

где  $\alpha = 1, 2$ ;  $q_i$ ,  $\partial T / \partial x_i$  — средние значения компонентов вектора плотности теплового потока и градиента температуры в объеме представительного элемента. Соотношения (5) позволяют установить связи

$$\bar{q}_i = \bar{A}_{ij} q_j, \quad \frac{\partial T_\alpha}{\partial x_i} = \bar{D}_{ij} \frac{\partial T}{\partial x_j}, \quad \chi_1 \bar{A}_{ij} + \chi_2 \bar{A}_{ij} = \delta_{ij}, \quad \chi_1 \bar{D}_{ij} + \chi_2 \bar{D}_{ij} = \delta_{ij}, \quad (6)$$

$$\lambda_{ij}^{(T)} = \chi_1 \lambda_{ik}^{(1)} \bar{D}_{kj} + \chi_2 \lambda_{ik}^{(2)} \bar{D}_{kj}, \quad k_{ij} = \chi_1 k_{ik}^{(1)} \bar{A}_{kj} + \chi_2 k_{ik}^{(2)} \bar{A}_{kj},$$

$\delta_{ij}$  — символ Кронекера. Если  $\lambda_{ij}^{(T)}$  и  $k_{ij}$  известны, то тензоры с компонентами  $\bar{\lambda}_{ij}^{(\alpha)}$  и  $\bar{k}_{ij}^\alpha$  определяются из соотношений

$$\chi_\alpha \left( \bar{\lambda}_{ik}^{(\alpha)} - \bar{\lambda}_{ik}^{(\nu)} \right) \bar{D}_{kj} = \lambda_{ij}^{(T)} - \lambda_{ij}^{(\nu)}, \quad (7)$$

$$\chi_\alpha \left( \bar{k}_{ik}^\alpha - \bar{k}_{ik}^\nu \right) \bar{A}_{kj} = k_{ij} - k_{ij}^\nu, \quad \alpha, \nu = 1, 2, \quad \alpha \neq \nu.$$

Умножив первое из уравнений (7) на  $\partial T / \partial x_j$ , а второе — на  $q_j$ , с учетом равенств (6) получим

$$\chi_\alpha \left( \bar{\lambda}_{ij}^{(\alpha)} - \bar{\lambda}_{ij}^{(\nu)} \right) \frac{\partial T_\alpha}{\partial x_j} = \left( \lambda_{ij}^{(T)} - \lambda_{ij}^{(\nu)} \right) \frac{\partial T}{\partial x_j}, \quad (8)$$

$$\chi_\alpha \left( \bar{k}_{ij}^\alpha - \bar{k}_{ij}^\nu \right) q_j = \left( k_{ij} - k_{ij}^\nu \right) q_j.$$

Если компоненты гетерогенного двухкомпонентного материала и эквивалентного гомогенного материала изотропны, то из соотношений (8) следуют равенства

$$\chi_\alpha \frac{\partial T_\alpha}{\partial x_i} = \frac{\lambda^{(T)} - \lambda_\nu^{(T)}}{\lambda_\alpha^{(T)} - \lambda_\nu^{(T)}} \frac{\partial T}{\partial x_i}, \quad \chi_\alpha \bar{q}_i = \frac{1/\lambda^{(T)} - 1/\lambda_\nu^{(T)}}{1/\lambda_\alpha^{(T)} - 1/\lambda_\nu^{(T)}} q_i, \quad (9)$$

где учтено  $k_\alpha = 1/\lambda_\alpha^{(T)}$ ,  $k = 1/\lambda^{(T)}$ .

Аналог потенциальной энергии деформации рассматриваемого гетерогенного материала объемом  $V$

$$U[T] = -\frac{1}{2} \int_V q_i \frac{\partial T}{\partial x_i} dV = -\frac{1}{2} \left( \chi_1 \int_V \overset{1}{q}_i \frac{\partial T_1}{\partial x_i} dV + \chi_2 \int_V \overset{2}{q}_i \frac{\partial T_2}{\partial x_i} dV + \int_V \left( \overset{2}{q}_i - \overset{1}{q}_i \right) \left( \frac{\partial T_1}{\partial x_i} - \frac{\partial T_2}{\partial x_i} \right) dV \right) = U_1[T] + U_2[T] + U_{12}[T],$$

где  $U_1[T]$ ,  $U_2[T]$ ,  $U_{12}[T]$  – средние значения аналогов потенциальной энергии деформации компонентов материала и потенциальной энергии их взаимодействия. Третье слагаемое в правой части последнего равенства можно представить в виде

$$U_{12}[T] = \frac{1}{2} A_\lambda \int_V \left( \lambda_V^{(T)} - \lambda^{(T)} \right) \left( \lambda^{(T)} - \lambda_R^{(T)} \right) \frac{\partial T}{\partial x_i} \frac{\partial T}{\partial x_i} dV,$$

где  $A_\lambda = \frac{\lambda_1^{(T)} \lambda_2^{(T)}}{\chi_1 \chi_2 \lambda_R^{(T)} \left( \lambda_1^{(T)} - \lambda_2^{(T)} \right)^2}$ ,  $\lambda_V^{(T)} = \chi_1 \lambda_1^{(T)} + \chi_2 \lambda_2^{(T)}$ ,  $\left( \lambda_R^{(T)} \right)^{-1} = \chi_1 \left( \lambda_1^{(T)} \right)^{-1} + \chi_2 \left( \lambda_2^{(T)} \right)^{-1}$ ;  $\lambda_V^{(T)}$ ,  $\lambda_R^{(T)}$  – оценки теплопроводности по неравенствам (4).

В том случае, когда эффективное значение  $\lambda^{(T)}$  фиксировано, любое изменение  $q_i$  и  $\partial T / \partial x_i$  приводит к соответствующему изменению средних значений  $\overset{\alpha}{q}_i$ ,  $\partial T_\alpha / \partial x_i$  в компонентах материала. С другой стороны, можно задать вариации значений  $\overset{\alpha}{q}_i$  и  $\partial T_\alpha / \partial x_i$ , не изменяя значения переменных  $q_i$  и  $\partial T / \partial x_i$ , что приводит к изменению эффективного значения  $\lambda^{(T)}$ .

Рассуждая далее аналогично тому, как это было сделано в работе [1] при получении оценок модуля всестороннего сжатия, можно получить неравенства

$$\frac{1}{2} \left( \lambda_V^{(T)} + \lambda_R^{(T)} \right) \geq \lambda^{(T)} \geq \frac{2 \lambda_R^{(T)} \lambda_V^{(T)}}{\lambda_V^{(T)} + \lambda_R^{(T)}}. \quad (10)$$

Отметим, что неравенства (10) эквивалентны первой группе неравенств (24) [1]. “Вилка” Хашина–Штрикмана для определения границ  $\lambda^{(T)}$  аналогична соответствующим неравенствам для модуля всестороннего сжатия, т.е.

$$\lambda_1^{(T)} + \frac{\chi_2 (\lambda_2^{(T)} - \lambda_1^{(T)})}{1 + \chi_1 a_1 (\lambda_2^{(T)} - \lambda_1^{(T)})} \geq \lambda^{(T)} \geq \lambda_2^{(T)} + \frac{\chi_1 (\lambda_1^{(T)} - \lambda_2^{(T)})}{1 + \chi_2 a_2 (\lambda_1^{(T)} - \lambda_2^{(T)})}, \quad \lambda_1^{(T)} > \lambda_2^{(T)};$$

где  $a_\alpha = 1/\lambda_\alpha^{(T)}$ ,  $\alpha = 1, 2$ .

Очевидно, что оценка теплопроводности по неравенствам (10) дает более узкий диапазон возможных значений  $\lambda^{(T)}$  по сравнению с “вилкой” Хашина–Штрикмана.

Для оценки величины температурного коэффициента линейного расширения  $\alpha^{(T)}$  и удельной массовой теплоемкости при постоянной деформации  $c_\varepsilon$  и напряжениях  $c_\sigma$  двухкомпонентной смеси воспользуемся выражениями для средних по объему  $V$  представительного элемента значений объемной плотности свободной энергии  $\rho A$  и термодинамического потенциала Гиббса  $\rho\Phi$  [2]:

$$\begin{aligned} \frac{1}{V} \int_V \rho A dV = & \frac{1}{2} K_* \left( \sum_{\alpha=1}^2 \chi_\alpha \varepsilon_{kk}^\alpha \right)^2 + \mu_* \left( \sum_{\alpha=1}^2 \chi_\alpha \varepsilon_{ij}^\alpha \right) \left( \sum_{\alpha=1}^2 \chi_\alpha \varepsilon_{ij}^\alpha \right) - \\ & - 3K_* \alpha_*^{(T)} \theta \sum_{\alpha=1}^2 \chi_\alpha \varepsilon_{kk}^\alpha - \frac{c_\varepsilon^*}{2T_0} \theta^2, \end{aligned} \quad (11)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{V} \int_V \rho \Phi dV = & \frac{1}{18K_*} \left( \sum_{\alpha=1}^2 \chi_\alpha \sigma_{kk}^\alpha \right)^2 + \frac{1}{4\mu_*} \left( \sum_{\alpha=1}^2 \chi_\alpha s_{ij}^\alpha \right) \left( \sum_{\alpha=1}^2 \chi_\alpha s_{ij}^\alpha \right) - \\ & - \frac{1}{2} \alpha_*^{(T)} \theta \sum_{\alpha=1}^2 \chi_\alpha \sigma_{kk}^\alpha - \frac{c_\sigma^*}{2T_0} \theta^2, \end{aligned}$$

где  $K_*, \mu_*, \alpha_*^{(T)}, c_\varepsilon^*, c_\sigma^* = c_\varepsilon^* + 9T_0 K_* \left( \alpha_*^{(T)} \right)^2 / \rho$  – эффективные свойства смеси, находящейся в однородном поле температуры  $\theta = T - T_0$ ,  $T_0 = \text{const}$ ,  $|T - T_0|/T_0 \ll 1$ .

Следуя работе [2], сначала рассмотрим на границе  $S$  объема  $V$  граничное условие

$$\sigma_{ij}^0 n_j = p_i^0 = \text{const}. \quad (12)$$

Полагая, что массовые силы отсутствуют, имеем

$$J[\hat{\sigma}, \theta] = I[\mathbf{u}, \theta], \quad (13)$$

где  $J[\hat{\sigma}, \theta] = - \int_V \rho \Phi dV - \int_{S_u} \sigma_{ij} \tilde{u}_i dS$  – дополнительная работа тела,

$I[\mathbf{u}, \theta] = \int_V \rho A dV - \int_{S_\sigma} p_i^0 u_i dS$  – полная потенциальная энергия тела.

Здесь  $S_\sigma$  и  $S_u$  — части поверхности  $S$ , на которых заданы компоненты векторов плотности поверхностных сил  $p_i^0$  и перемещений  $\tilde{u}_i$ . При выполнении граничных условий (12) из равенств (11) следуют соотношения

$$\frac{1}{V} I[\mathbf{u}, \theta] = -\frac{1}{2} (\sigma_{ij}^0 + 3K_* \alpha_*^{(T)} \theta \delta_{ij}) \sum_{\alpha=1}^2 \chi_\alpha \varepsilon_{ij}^\alpha - \frac{c_\varepsilon^*}{2T_0} \theta^2,$$

$$\frac{1}{V} J[\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \theta] = \frac{1}{2} \left( \sum_{\alpha=1}^2 \chi_\alpha \varepsilon_{ij}^\alpha + \alpha_*^{(T)} \theta \delta_{ij} \right) \sigma_{ij}^0 + \frac{c_\sigma^*}{2T_0} \theta^2,$$

которые записаны с учетом закона Дюамеля–Неймана для эффективных величин

$$\sum_{\alpha=1}^2 \chi_\alpha \bar{\sigma}_{ij}^\alpha = K_* \sum_{\alpha=1}^2 \chi_\alpha \bar{\varepsilon}_{kk}^\alpha \delta_{ij} + 2\mu_* \sum_{\alpha=1}^2 \chi_\alpha \bar{e}_{ij}^\alpha - 3K_* \alpha_*^{(T)} \theta \delta_{ij},$$

$$\sum_{\alpha=1}^2 \chi_\alpha \varepsilon_{ij}^\alpha = \frac{1}{9K_*} \sum_{\alpha=1}^2 \chi_\alpha \bar{\sigma}_{kk}^\alpha \delta_{ij} + \frac{1}{2\mu_*} \sum_{\alpha=1}^2 \chi_\alpha \bar{s}_{ij}^\alpha + \alpha_*^{(T)} \theta \delta_{ij}$$

и очевидных равенств

$$\int_V \sigma_{ij}^0 \varepsilon_{ij} dV = \int_S \sigma_{ij}^0 n_j u_i dS = \sigma_{ij}^0 \sum_{\alpha=1}^2 \chi_\alpha \varepsilon_{ij}^\alpha.$$

Если на границе  $S$  элементарного объема  $V$  задано граничное условие

$$\tilde{u}_i = u_i^0 = \varepsilon_{ij}^0 x_j, \quad \varepsilon_{ij}^0 = \text{const}, \quad (14)$$

то, как и ранее, при отсутствии массовых сил

$$\frac{1}{V} I[\mathbf{u}, \theta] = \frac{1}{2} \varepsilon_{ij}^0 \left( \sum_{\alpha=1}^2 \chi_\alpha \bar{\sigma}_{ij}^\alpha - 3K_* \alpha_*^{(T)} \theta \delta_{ij} \right) - \frac{c_\varepsilon^*}{2T_0} \theta^2,$$

$$-\frac{1}{V} J[\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \theta] = \frac{1}{2} (\varepsilon_{ij}^0 - \alpha_*^{(T)} \theta \delta_{ij}) \sum_{\alpha=1}^2 \chi_\alpha \bar{\sigma}_{ij}^\alpha + \frac{c_\sigma^*}{2T_0} \theta^2.$$

Если в выражениях  $J[\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \theta]$  и  $I[\mathbf{u}, \theta]$  истинные поля деформации и напряжений при заданных граничных условиях (12) и (14) заменить на произвольные, не обязательно удовлетворяющие уравнениям равновесия в объеме  $V$ , но обязательно граничным условиям, то должны выполняться неравенства

$$-\tilde{J}[\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \theta] \leq -J[\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \theta] \leq \tilde{I}[\mathbf{u}, \theta],$$

$$-\tilde{J}[\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \theta] \leq I[\mathbf{u}, \theta] \leq \tilde{I}[\mathbf{u}, \theta], \quad (15)$$

где  $\tilde{J}[\hat{\sigma}, \theta]$ ,  $\tilde{I}[\mathbf{u}, \theta]$  — дополнительная работа тела и полная потенциальная энергия тела, вычисленные на произвольных полях деформации и напряжений. Неравенства (15) записаны с учетом соотношения (13). Воспользовавшись граничными условиями (12), запишем первое неравенство (15) в явном виде:

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{V} \int_V \left( \frac{1}{18K} \sigma_{kk}^2 + \frac{1}{4\mu} s_{ij} s_{ij} + \alpha^{(T)} \theta \sigma_{kk} + c_\sigma \frac{\theta^2}{2T_0} \right) dV \leq \\ & \leq -\frac{1}{18K_*} (\sigma_{kk}^0)^2 - \frac{1}{4\mu_*} s_{ij}^0 s_{ij}^0 - \alpha_*^{(T)} \theta \sigma_{kk}^0 - c_\sigma^* \frac{\theta^2}{2T_0} \leq \\ & \leq \frac{1}{V} \int_V \left( \frac{1}{2} K \varepsilon_{kk}^2 + \mu e_{ij} e_{ij} - 3K \alpha^{(T)} \theta \varepsilon_{kk} - c_\varepsilon \frac{\theta^2}{2T_0} \right) dV - \frac{1}{V} \sigma_{ij}^0 \int_V \varepsilon_{ij} dV. \end{aligned} \quad (16)$$

Вторая цепочка неравенств (15) после подстановки граничных условий (14), примет вид

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{V} \int_V \left( \frac{1}{18K} \sigma_{kk}^2 + \frac{1}{4\mu} s_{ij} s_{ij} + \alpha^{(T)} \theta \sigma_{kk} + c_\sigma \frac{\theta^2}{2T_0} \right) dV + \frac{1}{V} \varepsilon_{ij}^0 \int_V \sigma_{ij} dV \leq \\ & \leq \frac{1}{2} K_* (\varepsilon_{kk}^0)^2 + \mu_* e_{ij}^0 e_{ij}^0 - 3K_* \alpha_*^{(T)} \theta \varepsilon_{kk}^0 - c_\varepsilon^* \frac{\theta^2}{2T_0} \leq \\ & \leq \frac{1}{V} \int_V \left( \frac{1}{2} K \varepsilon_{kk}^2 + \mu e_{ij} e_{ij} - 3K \alpha^{(T)} \theta \varepsilon_{kk} - c_\varepsilon \frac{\theta^2}{2T_0} \right) dV. \end{aligned}$$

Примем в неравенствах (16)  $\sigma_{ij} = \sigma_{ij}^0$ . Тогда, полагая неизвестные деформации однородными, получим

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{18} \left\langle \frac{1}{K} \right\rangle (\sigma_{kk}^0)^2 - \frac{1}{4} \left\langle \frac{1}{\mu} \right\rangle s_{ij}^0 s_{ij}^0 - \langle \alpha^{(T)} \rangle \theta \sigma_{kk}^0 - \langle c_\sigma \rangle \frac{\theta^2}{2T_0} \leq \\ & \leq -\frac{1}{18K_*} (\sigma_{kk}^0)^2 - \frac{1}{4\mu_*} s_{ij}^0 s_{ij}^0 - \alpha_*^{(T)} \theta \sigma_{kk}^0 - c_\sigma^* \frac{\theta^2}{2T_0} \leq \\ & \leq \frac{1}{2} \langle K \rangle (\varepsilon_{kk}^0)^2 + \langle \mu \rangle e_{ij} e_{ij} - 3 \langle K \alpha^{(T)} \rangle \theta \varepsilon_{kk} - \langle c_\varepsilon \rangle \frac{\theta^2}{2T_0} - \sigma_{ij}^0 \varepsilon_{ij}, \end{aligned} \quad (17)$$

где угловые скобки обозначают операцию статистического осреднения.

Величину  $\varepsilon_{ij}$  выберем такой, чтобы верхняя граница в выражении (17) была минимальной. Это приводит к условию

$$\langle K \rangle \varepsilon_{kk} \delta_{ij} + 2 \langle \mu \rangle e_{ij} - 3 \langle K \alpha^{(T)} \rangle \theta \delta_{ij} - \sigma_{ij}^0 = 0.$$

С помощью этого условия правую часть неравенств (17) можно записать иначе, что приводит их к другой форме:

$$\frac{1}{18} \left( \left\langle \frac{1}{K} \right\rangle - \frac{1}{K_*} \right) (\sigma_{kk}^0)^2 + \frac{1}{4} \left( \left\langle \frac{1}{\mu} \right\rangle - \frac{1}{\mu_*} \right) s_{ij}^0 s_{ij}^0 +$$

$$+ (\langle \alpha^{(T)} \rangle - \alpha_*^{(T)}) \theta \sigma_{kk}^0 + (\langle c_\sigma \rangle - c_\sigma^*) \frac{\theta^2}{2T_0} \geq 0. \quad (18)$$

$$\frac{1}{18} \left( \frac{1}{K_*} - \left\langle \frac{1}{K} \right\rangle \right) (\sigma_{kk}^0)^2 + \frac{1}{4} \left( \frac{1}{\mu_*} - \left\langle \frac{1}{\mu} \right\rangle \right) s_{ij}^0 s_{ij}^0 + \left( \alpha_*^{(T)} - \frac{\langle K \alpha^{(T)} \rangle}{\langle K \rangle} \right) \theta \sigma_{kk}^0 +$$

$$+ \left( \frac{c_\sigma^* - \langle c_\sigma \rangle}{2T_0} + \frac{9}{2} \left( \langle K (\alpha^{(T)})^2 \rangle - \frac{\langle K \alpha^{(T)} \rangle^2}{\langle K \rangle} \right) \right) \theta^2 \geq 0. \quad (19)$$

Переход от  $\langle c_\varepsilon \rangle$  к  $\langle c_\sigma \rangle$  в неравенстве (19) произведен с помощью зависимости  $\langle c_\sigma \rangle - \langle c_\varepsilon \rangle = 9T_0 \langle K (\alpha^{(T)})^2 \rangle$ . Примем теперь, что компоненты тензора напряжений  $\sigma_{ij}^0 = \sigma_0 \delta_{ij}$ ,  $\sigma_0 = \text{const}$ . Тогда неравенства (18) и (19) можно записать в виде

$$\frac{1}{18} \left( \left\langle \frac{1}{K} \right\rangle - \frac{1}{K_*} \right) x^2 + (\langle \alpha^{(T)} \rangle - \alpha_*^{(T)}) x + \frac{(\langle c_\sigma \rangle - c_\sigma^*)}{2T_0} \geq 0, \quad (20)$$

$$\frac{1}{18} \left( \frac{1}{K_*} - \left\langle \frac{1}{K} \right\rangle \right) x^2 + \left( \alpha_*^{(T)} - \frac{\langle K \alpha^{(T)} \rangle}{\langle K \rangle} \right) x +$$

$$+ \left( \frac{c_\sigma^* - \langle c_\sigma \rangle}{2T_0} + \frac{9}{2} \left( \langle K (\alpha^{(T)})^2 \rangle - \frac{\langle K \alpha^{(T)} \rangle^2}{\langle K \rangle} \right) \right) \geq 0, \quad (21)$$

где  $x = \sigma_0/\theta$ . Поскольку неравенства (20) и (21) должны выполняться при любых значениях  $x$ , заключаем, что

$$\left\langle \frac{1}{K} \right\rangle - \frac{1}{K_*} \geq 0, \quad \frac{1}{K_*} - \left\langle \frac{1}{K} \right\rangle \geq 0;$$

$$\langle c_\sigma \rangle - c_\sigma^* \geq 0, \quad \frac{c_\sigma^* - \langle c_\sigma \rangle}{2T_0} + \frac{9}{2} \left( \langle K (\alpha^{(T)})^2 \rangle - \frac{\langle K \alpha^{(T)} \rangle^2}{\langle K \rangle} \right) \geq 0.$$

Первая система неравенств дает оценку модуля всестороннего сжатия по Фойгту и Рейссу. Вторая система дает оценку удельной массовой теплоемкости материала  $c_\sigma^*$ :

$$\langle c_\sigma \rangle + 9T_0 \left( \frac{\langle K \alpha^{(T)} \rangle^2}{\langle K \rangle} - \langle K (\alpha^{(T)})^2 \rangle \right) \leq c_\sigma^* \leq \langle c_\sigma \rangle. \quad (22)$$

Необходимым и достаточным условием того, чтобы квадратичная форма  $y = ax^2 + bx + c$  при  $a > 0$  была неотрицательной, является требование неположительности ее дискриминанта  $D \equiv b^2 - 4ac$ .

Поэтому из неравенств (20) и (21) следует

$$\left(\langle \alpha^{(T)} \rangle - \alpha_*^{(T)}\right)^2 - \frac{2}{9} \left( \left\langle \frac{1}{K} \right\rangle - \frac{1}{K_*} \right) \frac{(\langle c_\sigma \rangle - c_\sigma^*)}{2T_0} \leq 0, \quad (23)$$

$$\begin{aligned} & \left( \alpha_*^{(T)} - \frac{\langle K \alpha^{(T)} \rangle}{\langle K \rangle} \right)^2 - \frac{2}{9} \left( \frac{1}{K_*} - \frac{1}{\langle K \rangle} \right) \left( \frac{c_\sigma^* - \langle c_\sigma \rangle}{2T_0} + \right. \\ & \left. + \frac{9}{2} \left( \left\langle K (\alpha^{(T)})^2 \right\rangle - \frac{\langle K \alpha^{(T)} \rangle^2}{\langle K \rangle} \right) \right) \leq 0. \end{aligned} \quad (24)$$

Система неравенств (23), (24) содержит в качестве неизвестных величин  $K_*$ ,  $\alpha_*^{(T)}$  и  $c_\sigma^*$ . Учитывая, что эффективный модуль всестороннего сжатия может быть рассчитан существенно точнее по вилке (24) из работы [1], будем в дальнейшем считать, что его точное значение известно. Тогда система неравенств (23), (24) будет определять область допустимых значений эффективных величин  $\alpha_*^{(T)}$  и  $c_\sigma^*$ .

Неравенства (23), (24) ограничивают возможные значения  $\alpha_*^{(T)}$  и  $c_\sigma^*$  внутренними областями парабол, уравнения которых получаются из неравенств (23), (24) заменой знака неравенства на равенство. Обе параболы имеют оси симметрии, параллельные оси  $c_\sigma^*$ . Очевидно, что вилка для  $c_\sigma^*$  определяется максимальным и минимальным значениями на границе области пересечения парабол. Эта вилка совпадает с неравенствами (22).

Для нахождения вилки величины  $\alpha_*^{(T)}$  заменим в выражениях (23) и (24) неравенства на равенства и исключим  $c_\sigma^*$ . Это приводит к уравнению

$$\alpha_*^{(T)2} \left( 1 + \frac{\tilde{b}}{b} \right) - 2\alpha_*^{(T)} \left( c + \frac{\tilde{b}}{b} \langle \alpha^{(T)} \rangle \right) + c^2 - \tilde{b}\tilde{c} + \frac{\tilde{b}}{b} \langle \alpha^{(T)} \rangle^2 = 0, \quad (25)$$

где  $b = \frac{2}{9} \left( \left\langle \frac{1}{K} \right\rangle - \frac{1}{K_*} \right)$ ,  $\tilde{b} = \frac{2}{9} \left( \frac{1}{K_*} - \frac{1}{\langle K \rangle} \right)$ ,  $c = \frac{\langle K \alpha^{(T)} \rangle}{\langle K \rangle}$ ,  
 $\tilde{c} = \frac{9}{2} \left( \left\langle K (\alpha^{(T)})^2 \right\rangle - \frac{\langle K \alpha^{(T)} \rangle^2}{\langle K \rangle} \right)$ .

Решение уравнения (25) определяет границы для эффективных значений температурного коэффициента линейного расширения:

$$\alpha_{*\pm}^{(T)} = \frac{c + \frac{\tilde{b}}{b} \langle \alpha^{(T)} \rangle}{1 + \frac{\tilde{b}}{b} \langle \alpha^{(T)} \rangle} \pm \frac{D}{1 + \frac{\tilde{b}}{b} \langle \alpha^{(T)} \rangle}, \quad (26)$$

$$D = \left[ \frac{\tilde{b}}{b} \left( \tilde{c}(b + \tilde{b}) - (\langle \alpha^{(T)} \rangle - c)^2 \right) \right]^{1/2}.$$

Так как диапазон изменения температуры, в котором происходят фазовые превращения, достаточно узок, то в зависимости от направления этого процесса или  $\theta = T - M_s$ , или  $\theta = T - A_s$  и  $|\theta| / M_s \ll 1$ ,  $|\theta| / A_s \ll 1$ , где  $A_s, M_s$  – температуры начала превращения мартенсита в аустенит и аустенита в мартенсит. В этом случае в соотношении (7) [1] положим

$$B(T, \chi) = -\frac{1}{2} \frac{c_\varepsilon}{T} \theta^2 + \frac{m_\varepsilon}{T} \theta \chi + B_1(\chi), \quad B_1(\chi) = -\frac{1}{2} \gamma_\varepsilon \chi^2 \quad (27)$$

и примем

$$\varepsilon_{ij}^{(T)} = \alpha_{ij}^{(T)} \theta, \quad \varepsilon_{ij}^{(\chi)} = \alpha_{ij}^{(\chi)} \chi, \quad (28)$$

где  $\alpha_{ij}^{(T)}, \alpha_{ij}^{(\chi)}$  – компоненты тензоров температурных коэффициентов линейного расширения и коэффициентов фазовой деформации. С учетом соотношений (27) и (28) выражение (7) [1] примет следующий вид:

$$\begin{aligned} \rho A(\varepsilon_{kl}, T, \chi) = & \frac{1}{2} C_{ijkl} \varepsilon_{kl} \varepsilon_{ij} - \beta_{ij}^{(T)} \varepsilon_{ij} \theta - \beta_{ij}^{(\chi)} \varepsilon_{ij} \chi - \\ & - \frac{1}{2} \rho \frac{c_\varepsilon}{T_0} \theta^2 + \rho \frac{m_\varepsilon}{T_0} \theta \chi - \frac{1}{2} \rho \gamma_\varepsilon \chi^2, \end{aligned} \quad (29)$$

где  $\beta_{ij}^{(T)} = C_{ijkl} \alpha_{kl}^{(T)}$ ,  $\beta_{ij}^{(\chi)} = C_{ijkl} \alpha_{kl}^{(\chi)}$ ,  $T_0 = M_s$  или  $T_0 = A_s$ .

Так как диссипативная функция  $\delta_D \geq 0$  всегда, то с точностью до линейных слагаемых по компонентам тензора деформации  $\varepsilon_{ij}$  из равенства (29) имеем

$$\delta_D = -\rho \frac{\partial A}{\partial \chi} \dot{\chi} = \rho \left( -\frac{m_\varepsilon}{T_0} \theta + \gamma_\varepsilon \chi \right) \dot{\chi} \geq 0.$$

Последнее неравенство выполняется всегда, потому что при нагревании материала происходит превращение мартенсита в аустенит и объемная доля мартенсита  $\chi$  убывает,  $\dot{\chi} < 0$ . При обратном превращении с понижением температуры объемная доля мартенсита  $\chi$  возрастает,  $\dot{\chi} > 0$ .

Рассмотрим представительный объем  $V$  материала. Пусть этот объем находится в однородном поле температуры. Тогда при  $\varepsilon_{ij} = 0$  и  $r = 0$  из уравнения (12) [1] следует

$$\rho c_\varepsilon \dot{\theta} - \rho m_\varepsilon \dot{\chi} + \rho (m_\varepsilon \theta / T_0 - \gamma_\varepsilon \chi) \dot{\chi} = Q(t), \quad (30)$$

где  $Q(t) = q(t)S/V$ ,  $S$  – площадь поверхности представительного элемента,  $q(t)$  – плотность подводимого к этой поверхности теплового потока,  $Q(t)$  – количество теплоты, полученное единицей объема представительного элемента в единицу времени. Найдем верхнюю и нижнюю границы удельной массовой конфигурационной теплоемкости материала  $m_\varepsilon$  и коэффициента  $\gamma_\varepsilon$  из графика зависимости количества теплоты  $Q_T$ , переданного единице массы материала при его

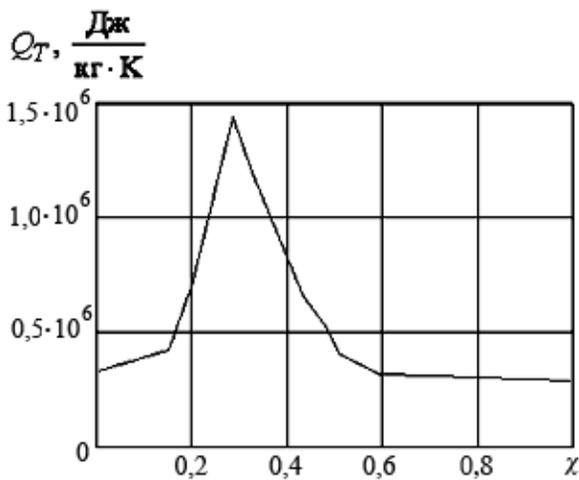


Рис. 1. Зависимость количества теплоты, переданного 1 кг материала никелида титана при его нагреве на 1К, от температуры

нагревании на 1К [ 3 ] (рис. 1), по соотношению (30) с использованием неравенств (22) и равенства  $c_\sigma = c_\varepsilon + 9T_0K(\alpha^{(T)})^2$  :

$$\frac{\rho c_\varepsilon^{down}(\chi)\Delta T - S(\Delta T, \Delta\chi, T, \chi)}{\rho\Delta\chi} \leq m_\varepsilon(\chi) \leq \frac{\rho c_\varepsilon^{up}(\chi)\Delta T - S(\Delta T, \Delta\chi, T, \chi)}{\rho\Delta\chi}, \quad (31)$$

$$m_\varepsilon^{down}(\chi)\theta/(T_0\chi) \leq \gamma_\varepsilon(\chi) \leq m_\varepsilon^{up}(\chi)\theta/(T_0\chi), \quad (32)$$

где  $c_\varepsilon^{down}$ ,  $c_\varepsilon^{up}$  — нижняя и верхняя границы удельной массовой теплоемкости материала (см. (22)),  $m_\varepsilon^{down}$ ,  $m_\varepsilon^{up}$  — нижняя и верхняя границы удельной массовой конфигурационной теплоемкости материала,  $S(\Delta T, \Delta\chi, T, \chi)$  — количество теплоты, переданное единице объема материала для изменения температуры тела на  $\Delta T$  и изменения доли мартенсита в материале на  $\Delta\chi$ ;  $T, \chi$  — исходное значение температуры и объемной доли мартенсита. Соотношения (31) и (32) получены с учетом предположения, что диссипация энергии отсутствует. Предположим, что объемная доля мартенсита линейно зависит от температуры материала и  $S(\Delta T, \Delta\chi, T, \chi)$  будем вычислять как площадь трапеции  $S(\Delta T, \Delta\chi, T, \chi) = \frac{1}{2}(Q_{T+\Delta T})\Delta T$ . Таким образом, в случае обратного фазового превращения, выражения (31), (32) можно представить в следующем виде:

$$\left( c_{\varepsilon}^{down}(\chi) - \frac{1}{2} \frac{Q_T + Q_{T+\Delta T}}{\rho} \right) (A_s - A_f) \leq m_{\varepsilon}(\chi) \leq \left( c_{\varepsilon}^{up}(\chi) - \frac{1}{2} \frac{Q_T + Q_{T+\Delta T}}{\rho} \right) (A_s - A_f), \quad (33)$$

$$m_{\varepsilon}^{down}(\chi) \frac{T - A_s}{T - A_f} \frac{A_s - A_f}{A_s} \leq \gamma_{\varepsilon}(\chi) \leq m_{\varepsilon}^{up}(\chi) \frac{T - A_s}{T - A_f} \frac{A_s - A_f}{A_s}. \quad (34)$$

Численный анализ границ величин  $c_{\varepsilon}$ ,  $m_{\varepsilon}$ ,  $\gamma_{\varepsilon}$  по неравенствам (22), (33), (34) проводился для никелида титана (49% Ti) [3,4] (рис. 2–4).

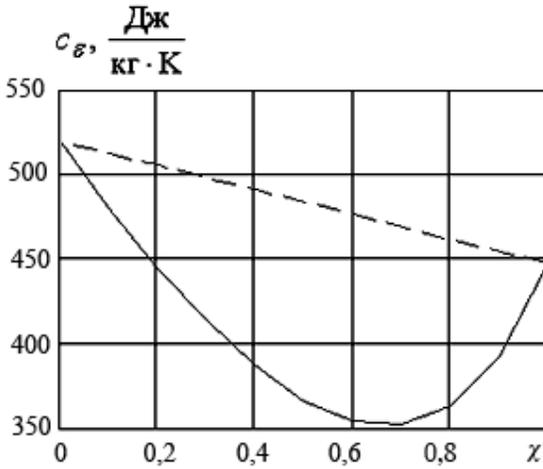


Рис. 2. Зависимость нижней (сплошная линия) и верхней (штриховая линия) оценок теплоемкости никелида титана от объемной доли мартенсита

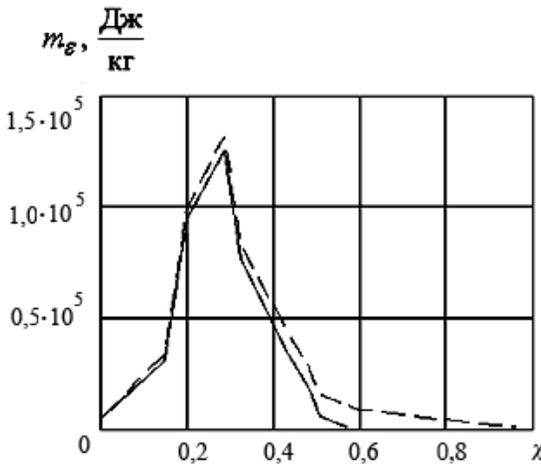


Рис. 3. Зависимость нижней (сплошная линия) и верхней (штриховая линия) оценок конфигурационной теплоемкости никелида титана от объемной доли мартенсита

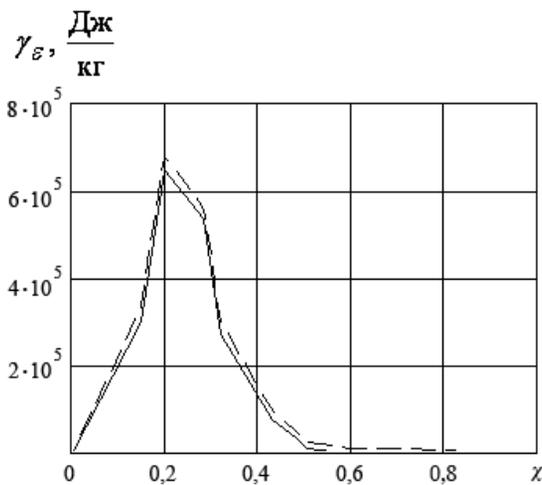


Рис. 4. Зависимость нижней (сплошная линия) и верхней (штриховая линия) величины  $\gamma_{\epsilon}$  никелида титана от объемной доли мартенсита

В том случае, если охлаждение (нагревание) тела проходит при  $\sigma_{ij} = 0$ , то деформация тела будет состоять из температурной и фазовой:

$$\varepsilon_{ij}^{(T,\chi)} = \alpha_{ij}^{(T)}\theta \pm \alpha_{ij}^{(\chi)}(\chi - \chi_0), \quad (35)$$

Выбор знака перед вторым слагаемым в правой части равенства (35) определяется свойствами кристаллической структуры и составом рассматриваемого материала. Так, при возрастании температуры от значения  $A_s$  длина  $l$  цилиндрических образцов из одних (изотропных) материалов в зоне фазового превращения может увеличиваться, а из других (также изотропных) — уменьшаться [3–5]. При понижении температуры от значения  $M_s$  до окончания обратного превращения эффект противоположен.

На рис. 5 и 6 приведены расчетные границы температурного коэффициента линейного расширения  $\alpha^{(T)}$  и коэффициента фазовой деформации  $\alpha^{(\chi)}$  по неравенствам (25) и (35) для никелида титана

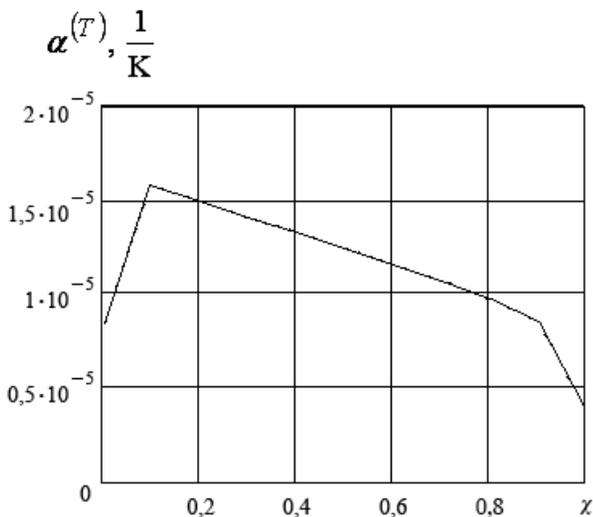
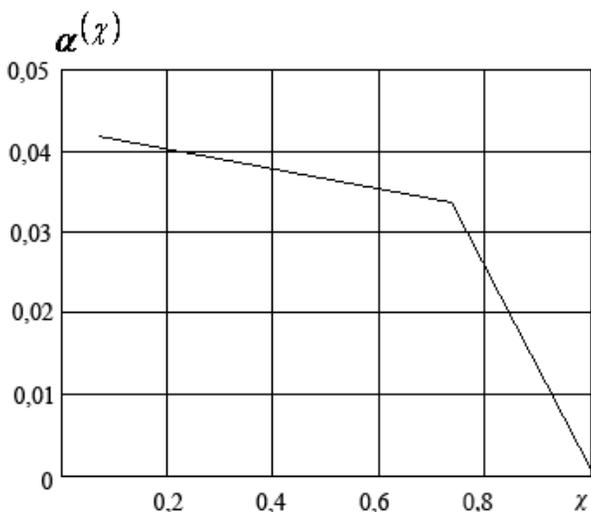


Рис. 5. Зависимость коэффициента температурного линейного расширения никелида титана от объемной доли мартенсита



**Рис. 6. Зависимость коэффициента фазового расширения никелида титана от объемной доли мартенсита**

(53,8% Ti) по экспериментальным данным из работы [3]. Отметим, что верхние и нижние границы коэффициентов  $\alpha^{(T)}$  и  $\alpha^{(x)}$  на соответствующих рисунках практически неразличимы.

В заключение можно отметить, что предложенный подход к определению термомеханических свойств металлов и сплавов в зоне фазового превращения позволяет получить оценки необходимых для расчетов значений параметров материалов.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Кувыркин Г. Н., Родикова И. С. Термомеханическая модель поведения металлов и сплавов в зоне фазового превращения // Вестник МГТУ. Сер. “Естественные науки”. – 2006. – № 1. – С. 65–76.
2. Шермегор Т. Д. Теория упругости микронеоднородных сред. – М.: Наука, 1977. – 400 с.
3. Сплавы с эффектом памяти формы / Ооцука К., Симидзу К., Судзуки Ю. и др.: Пер. с японск. – М.: Металлургия, 1990. – 224 с.
4. Лихачев В. А., Кузьмин С. Л., Каменцева З. П. Эффект памяти формы. – Л.: Изд-во ЛГУ, 1987. – 216 с.
5. Абдрахманов С. Деформация материалов с памятью формы при термосиловом воздействии. – Бишкек: Илим, 1991. – 115 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. Автор более 100 научных работ в области термомеханики и структурной механики конструкционных элементов.

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 more 100 publications in the field of thermal mechanics and thermal structural mechanics of construction elements.