

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт проблем машиноведения Российской академии наук

На правах рукописи



Фролова Ксения Петровна

АНАЛИЗ ВЛИЯНИЯ МИКРОСТРУКТУРЫ ДЕФОРМИРУЕМОГО
ТЕЛА НА ХАРАКТЕРИСТИКИ МАССОПЕРЕНОСА

Специальность 1.1.8 (ранее 01.02.04) – механика деформируемого твердого тела

Диссертация на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
доктор физико-математических наук,
Вильчевская Елена Никитична

Санкт-Петербург

2022

Оглавление

Введение	5
1. Эффективные свойства пористого материала с учетом сегрегации	21
1.1 Постановка задачи гомогенизации	22
1.2 Тензоры вклада неоднородности с неидеальным контактом в диффузионные свойства	25
1.3 Эффективные диффузионные свойства	34
1.3.1 Обобщенные методы гомогенизации	35
1.3.2 Эффективный тензор диффузии трансверсально-изотропного материала	50
1.4 Границы эффективных диффузионных свойств	54
1.5 Влияние микроструктуры на эффективные коэффициенты диффузии	55
1.6 Верификация результатов	62
1.7 Эффективные упругие свойства	65
1.7.1 Эффективные упругие модули материала с характерной для водородной деградации микроструктурой	66
1.7.2 Влияние микроструктуры на эффективные модули Юнга	71
1.7.3 Верификация результатов	74
1.8 Перекрестные соотношения между эффективными диффузионными и упругими свойствами	75
1.8.1 Общий вид перекрестных соотношений	77

1.8.2	Перекрестные соотношения между эффективными модулями Юнга и коэффициентами диффузии	80
1.8.3	Влияние сегрегации на перекрестные соотношения	84
1.9	Основные результаты	86
2.	Моделирование поверхностного эффекта в рамках микрополярной теории	88
2.1	Основные уравнения микрополярной теории упругости	91
2.1.1	Общая микрополярная теория	91
2.1.2	Теория моментных напряжений	96
2.2	Краевая задача для длинного цилиндра	98
2.2.1	Микрополярная среда	100
2.2.2	Микрополярная среда со стесненным вращением	103
2.3	Аналитическое асимптотическое решение	104
2.4	Определение неклассических упругих модулей	110
2.5	Численный метод решения краевой задачи в рамках микрополярной теории	113
2.6	Напряженно-деформированное состояние поверхностного слоя .	119
2.7	Локализованная пластическая деформация	121
2.7.1	Критерии пластичности для микрополярных сред	122
2.7.2	Оценка области локализации пластической деформации .	125
2.8	Основные результаты	131
3.	Моделирование процесса диффузии в деформируемом твердом теле с учетом влияния неоднородной микроструктуры	133
3.1	Моделирование процесса диффузии в пористом материале . . .	135
3.1.1	Задачи диффузии и массопругости в рамках классической теории	136
3.1.2	Начально-краевая задача в рамках классической теории	138

3.1.3	Численный метод решения задачи массопругости в рамках классической теории	140
3.1.4	Влияние заданной неоднородной микроструктуры	143
3.1.5	Влияние растрескивания в процессе диффузии	146
3.2	Моделирование процесса диффузии вблизи поверхности	149
3.2.1	Задача массопругости в рамках микрополярной теории	150
3.2.2	Начально-краевая задача в рамках микрополярной теории	155
3.2.3	Численный метод решения задачи массопругости в рамках микрополярной теории	160
3.2.4	Влияние напряженно-деформированного состояния . . .	162
3.3	Основные результаты	174
Заключение		175
Литература		178

Введение

Микроструктура материала оказывает существенное влияние на массоперенос. В частности, компоненты композитов характеризуются разными коэффициентами диффузии, границы зерен поликристаллов представляют собой пути ускоренной диффузии, несплошности являются ловушками для диффундирующего вещества [121,128]. Накопление вредных примесей может привести к деградации механических свойств материала на макроуровне и преждевременному выходу из строя готовой продукции. Критичным может оказаться как суммарное количество диффундирующего вещества, так и локальное увеличение концентрации при общем малом содержании. Таким образом, для предсказания более точных сроков эксплуатации готовой продукции и предотвращения вызванных накоплением вредных примесей аварий важен корректный учет особенностей микроструктуры материала и происходящих на мезоуровне процессов при описании массопереноса.

Актуальность темы исследования

Развитие промышленности способствовало созданию новых материалов, обладающих экстремальными свойствами (повышенной прочностью, износостойкостью и т.д.). Такие материалы особенно чувствительны к влиянию даже малых концентраций вредных примесей, наиболее распространенной из которых является водород. В частности, проблема водородной деградации имеет большое значение для нефтегазовой промышленности, поскольку водород и его соединения входят в состав перекачиваемых нефтепродуктов.

Экспериментальному исследованию взаимовлияния микроструктуры материала и накопления в нем водорода посвящено большое количество ра-

бот. На их основе можно выделить следующие явления, учет которых при моделировании позволит предсказать более точные сроки эксплуатации конструкций и снизить риски возникновения аварий. Так, наличие образованных в процессе производства несплошностей в защитных антикоррозионных покрытиях увеличивает проницаемость материала и может привести к нарушению изоляции металла от агрессивной среды [69,156]. Результаты водородной диагностики алюминия свидетельствуют о том, что концентрация в нем водорода напрямую связана с концентрацией образованных при кристаллизации пор [41,109]. В металлах и сплавах водород диффундирует по границам зерен и приводит к образованию трещин преимущественно между соседними зернами и в местах тройного стыка зерен, а также к появлению водородных блистеров [59,168]. При насыщении водородом стальных изделий наблюдается существенно неравномерное распределение примеси по толщине образца: фактически, насыщается только тонкий поверхностный слой толщиной порядка характерного размера зерна [49,60,61,113,137,160].

На сегодняшний день проблема водородной деградации содержит много открытых вопросов. Существующие модели в большинстве своем посвящены в первую очередь непосредственно описанию процесса водородного охрупчивания, тогда как предшествующий этому процесс переноса водорода описывается с помощью наиболее простых феноменологических моделей диффузии, не позволяющих учесть ряд эффектов. В частности, в литературе нет однозначного объяснения поверхностного эффекта при наводороживании, чаще всего он попросту игнорируется, а распределение водорода предполагается равномерным. Помимо этого, экспериментальные данные о коэффициентах диффузии водорода в материалах имеют большой разброс, одной из причин которого можно выделить существенное влияние на перенос водорода дефектов микроструктуры, к которым, в том числе, относятся несплошности. Для полного понимания всех аспектов явления водородной деградации необходи-

ма дальнейшая разработка моделей, учитывающих взаимное влияние микроструктуры и транспорта водорода.

Помимо водородной деградации металлов и сплавов, проблема анализа влияния микроструктуры на массоперенос возникает в геологии при определении свойств и поведения горных пород, в материаловедении при разработке новых функциональных материалов с внутренней микроструктурой и т.д.

Работа посвящена развитию моделей механики сплошных сред, интегральным образом учитывающих влияние микроструктуры на характеристики и поведение материала на макроуровне. Такой подход является фундаментальным и позволяет прогнозировать поведение широкого класса материалов со сложной внутренней структурой. В частности, для корректного учета влияния микроструктуры непосредственно на массоперенос возникает необходимость в определении эффективных характеристик гетерогенного материала и в описании процессов, происходящих на мезоуровне. При этом для описания поверхностного эффекта при диффузии развиваемые подходы должны быть применимы к моделированию эффектов, проявляющихся на масштабах, сопоставимых с размером структурной неоднородности материала.

Степень разработанности темы исследования

В настоящее время имеется большое количество подходов, позволяющих установить взаимосвязь между поведением материала на различных масштабных уровнях. Наиболее распространенные подходы основаны на введении в модель параметров структуры. В случае, когда требуется описать поведение материала с заданной микроструктурой, макроскопические (эффективные) свойства материала определяются через фиксированные структурные параметры. Эффективные свойства связывают между собой средние поля (поле напряжений с полем деформаций в контексте упругости, градиент температуры и тепловой поток в контексте теплопроводности, градиент концентрации и поток диффундирующего вещества в контексте диффузии и т.д.)

и могут быть измерены при проведении макроскопических экспериментов.

Детальный обзор истории методов микромеханики гетерогенных материалов представлен в работах Р. Кристенсена [29], К.З. Markov [112], S. Kanaun и V. Levin [91], М. Kachanov и I. Sevostianov [87].

W. Voigt [167] и А. Reuss [140] предложили универсальные оценки эффективных упругих модулей материала (“границы Фойгта-Рейсса” или “вилка Фойгта-Рейсса”), основываясь только на соотношениях компонентов композита. Аналогом границ Фойгта-Рейсса для проводимости являются границы (вилка) Винера [169]. Эти границы построены без каких-либо ограничений на геометрию микроструктуры, но, как правило, представляют собой очень широкий диапазон, особенно в случае сильного контраста между свойствами компонент композита. Z. Hashin и S. Shtrikman [82, 83] построили границы для изотропного на макроуровне материала на основании вариационного принципа. Для получения более точных оценок эффективных свойств материала используются различные методы гомогенизации, основанные на решении задачи Эшелби об изолированной неоднородности, помещенной в бесконечную матрицу (сам J.D. Eshelby решал эту задачу для эллипсоидальной неоднородности в контексте упругости, определив поля напряжений и деформаций внутри и вне неоднородности, а также концентрацию напряжений на границе [66, 67]). При решении задачи гомогенизации множественные изолированные неоднородности помещаются в некий конечный репрезентативный объем. Наиболее простым методом гомогенизации является метод гомогенизации без учета взаимодействия, при котором неоднородности рассматриваются как изолированные, их влиянием друг на друга пренебрегается. Для учета взаимовлияния неоднородностей обычно используются самосогласованные схемы, в которых изолированные неоднородности помещаются в эффективное окружение. Наиболее широко используемыми схемами являются метод эффективной среды, метод эффективного поля и метод Максвелла. В мето-

де эффективной среды изолированные неоднородности помещаются в среду, свойства которой отличаются от свойств матрицы. Основы метода были заложены O.F. Mossotti [51]; разработкой метода занимались Р. Кристенсен, Е.Н. Kerner, J.C. Smith и др. [50,94,155]. В методе эффективного поля, предпосылки которого были заложены в работе R. Clausius [51], изолированные неоднородности помещаются в поле, отличное от приложенного. Основной вклад в развитие метода внесли Т. Mori и К. Tanaka, Y. Benveniste, S.K. Kanaun и V.M. Levin [45,90,92,129]. J.C. Maxwell [115] определил эффективную электрическую проводимость материала, содержащего произвольно расположенные сферические частицы, введя в рассмотрение эффективную неоднородность и определив вызванное присутствием неоднородностей возмущение поля в удаленной точке. Схема Максвелла была обобщена в работах Н. Fricke, L.N. McCartney, A. Kelly, I. Sevostianov, A. Giraud, S.K. Kanaun, V.M. Levin, M. Markov и др. для случая различных по природе эффективных свойств материалов с эллипсоидальными неоднородностями [71, 87, 106, 119, 120, 149].

На сегодняшний день опубликовано большое количество работ, посвященных определению эффективных упругих и проводящих свойств материалов с изотропными неоднородностями эллипсоидальной формы, имеющими различное распределение по ориентациям. На основании подобия уравнений диффузии и проводимости, R.M. Barrer [42] переписал некоторые схемы для определения эффективных коэффициентов диффузии гетерогенного материала. Y. Zhang и L. Liu [173] обратили внимание на принципиальную разницу между задачами диффузии и теплопроводности, заключающуюся в том, что температура является непрерывной функцией на границах раздела фаз, тогда как концентрация может испытывать скачок. Они предложили использовать подобие между определяющими соотношениями для теплового потока и потока массы при выражении последнего через градиент химического потенциала, который является непрерывным. Такой подход позволил построить

границы Винера и Хашина-Штрикмана для эффективной подвижности диффундирующего вещества и затем выразить через нее эффективные коэффициенты диффузии. Важность учета сегрегации при определении вклада зернограничной диффузии подчеркивалась в работах Б.С. Бокштейна, I. Kaup и Yu. Mishin [3, 93]. В [93] для учета такого эффекта в рассмотрение был введен параметр сегрегации. J.R. Kalnin, I.V. Belova и G.E. Murch [43, 88] ввели параметр сегрегации в модифицированный метод эффективной среды и определили эффективный коэффициент диффузии материала со сферическими неоднородностями. Эффективные коэффициенты диффузии поликристалла с произвольно ориентированными сфероидальными зернами с учетом эффекта сегрегации были определены А.Г. Князевой и соавторами [96] с помощью метода без учета взаимодействия, метода Мори-Танака и схемы Максвелла. При этом наличие сегрегации не было учтено при осреднении полей, тогда как согласно, например, Y. Benveniste и K.Z. Markov [44, 112], скачок концентрации должен быть учтен в том числе и на данном этапе решения задачи гомогенизации.

Таким образом, вопрос учета сегрегации при определении эффективных коэффициентов диффузии гетерогенных материалов со сложной микроструктурой остается открытым. Требуется дальнейшее обобщение методов, используемых в контексте задач проводимости, которые, в свою очередь, могут быть использованы в контексте диффузии только при отсутствии сегрегации.

Одним из основных понятий в микромеханике является понятие репрезентативного объема, который, с одной стороны, должен быть достаточно малым с макроскопической точки зрения, чтобы его можно было рассматривать как частицу среды на макроуровне, а с другой стороны – достаточно большим в микроскопическом масштабе, чтобы содержать большое количество неоднородностей и, таким образом, действительно быть “представительным” с точки зрения учета микроструктуры [84, 112]. В связи с этим возникает вопрос при-

менимости методов микромеханики при описании эффектов, проявляющихся на масштабах, сопоставимых с размерами структурной неоднородности. Как правило, для учета размерного эффекта с помощью континуальных подходов используются модели механики обобщенных сред, содержащие параметры размерности длины. Частица такой среды несет в себе информацию о структуре материала. При этом учитываются либо дополнительные внутренние степени свободы частиц континуума (микрополярная теория, микроморфная теория), либо зависимость энергии деформации от высших градиентов (градиентная теория). Наряду с силовым взаимодействием между частицами среды учитываются моментные взаимодействия, а напряженное состояние описывается несимметричными в общем случае тензорами напряжений.

Истоки учета моментных напряжений в среде восходят к трудам W. Voigt [166]. Изучая упругие свойства кристаллов, он обобщил классическую симметричную теорию упругости на несимметричную. Этот подход был использован братьями Коссера [52], которые предложили рассматривать помимо трансляционных независимые вращательные степени свободы частиц среды, что привело к появлению независимых моментных напряжений. Позднее А.С. Eringen ввел термин “микрополярная среда” для описания сред Коссера. Механика микрополярных сред получила развитие в основополагающих работах Э.Л. Аэро, В. Новацкого, В.А. Пальмова, П.А. Жилина, Е. Kroner, R.D. Mindlin, R.A. Toupin, А.С. Eringen [20, 32, 65, 98, 127, 133, 134, 162, 163]. Положение частицы микрополярной среды определяется радиус-вектором, а ее ориентация задается при помощи триэдра ортонормированных векторов (директоров). Частным случаем микрополярной среды является среда со “стесненным вращением” (“псевдоконтинуум Коссера”, “теория моментных напряжений”). Основные положения данной теории изложены в работах Э.Л. Аэро, Е.В. Кувшинского, R.D. Mindlin, W.T. Koiter, Н.Ф. Морозова, Г.Н. Савина и др. [9, 10, 17, 19, 97, 123, 127]. В рамках теории микрополярных сред со стес-

ненным вращением предполагается, что микроповорот определяется ротором перемещений, независимые вращения отсутствуют. При этом взаимодействие между частицами среды происходит посредством как силовых, так и моментных напряжений. Микроморфные среды, допускающие деформацию директоров, изучались В.И. Ерофеевым, Л.М. Зубовым, W.T. Koiter, R.D. Mindlin, R.A. Toupin, A.C. Eringen и др. [21, 64, 97, 124, 163, 174]. Среда с внутренними степенями свободы изучалась также М.А. Гузовым, И.А. Куниным, В.П. Мясниковым [4, 12, 99]. Градиентная теория была впервые сформулирована в работах R.D. Mindlin, R.A. Toupin [125, 126, 162] и развита в работах E.C. Aifantis, С.А. Лурье, F. dell'Isola, C. Polizzotto и др. [14, 33, 34, 56, 77, 138]. Обзор различных обобщенных теорий представлен в работах В.И. Ерофеева, S. Forest и R. Sievert [21, 70].

Применение обобщенных теорий сопряжено со сложностью идентификации неклассических материальных констант. Определяющим явлением, позволяющим измерить неклассические параметры, является предсказываемый обобщенными теориями размерный эффект, проявляющийся на масштабах, сопоставимых с масштабом структурной неоднородности материала. Методы, используемые при идентификации материальных констант, описаны, например, в работах А.А. Адамова [30] и И.Ю. Смолина [23]. К этим методам можно отнести методы размерных эффектов, основанные на предсказываемой микрополярной теорией зависимости жесткости образцов от их размеров при изгибе и кручении стержней и пластинок; методы волновых эффектов, основанные на явлении дисперсии сдвиговых волн; полевые методы, основанные на исследовании поля деформаций вблизи концентраторов напряжений; расчетные методы, основанные на применении процедур осреднения для гетерогенных материалов с известной внутренней структурой [23, 30]. На сегодняшний день материальные константы определены лишь для некоторых материалов типа костной ткани, пенопластов, некоторых крупнозернистых

металлов и композитов [23, 30, 31, 40, 76, 100, 110, 136, 145, 172].

Таким образом, обобщенные теории могут быть применены для описания поведения тонких поверхностных слоев, при этом основная сложность состоит в минимизации количества неизвестных материальных параметров в решаемых уравнениях и их идентификации.

Для определения концентрации диффундирующего вещества в материале с микроструктурой необходимо описать процесс диффузии. Особый интерес представляет учет влияния неоднородной микроструктуры на распределение примесей в материале, поскольку чаще всего дефекты структуры локализованы вблизи поверхности.

Как правило, диффузия примеси в твердых телах описывается с помощью феноменологических моделей. Часто описание процесса диффузии основывается на классическом законе Фика, предполагающем зависимость потока только от градиента концентрации. Наиболее строгий подход к построению определяющего соотношения для потока основывается на рассмотрении двухкомпонентной среды, состоящей из подвижной примеси и насыщаемого деформируемого твердого тела, и построении балансовых соотношений для обеих компонент и для “эффективной” среды, дополненных уравнениями состояния. В таком случае поток диффундирующего вещества выражается через относительную скорость примеси и в результате зависит, помимо градиента концентрации, от целого ряда параметров – в том числе, от напряжений в среде и силы взаимодействия между компонентами. Получить точное решение сложного нелинейного кинетического уравнения для потока невозможно, что приводит к необходимости использования упрощающих анализ предположений. В частности, в некоторых работах делается предположение о характере внутренних сил взаимодействия [1, 15, 85]. Чаще всего для учета влияния напряженно-деформированного состояния на процесс массопереноса определяющее соотношение для потока строится исходя из принципов

неравновесной термодинамики. Основные положения об описании процесса массопереноса в рамках неравновесной термодинамики изложены, например, в книге Н. Mehrer [121] и в современных работах А.Г. Князевой [22] и С.И. Сердюкова [25].

Таким образом, для учета влияния структурных особенностей материала на массоперенос с помощью существующих моделей диффузии, учитывающих влияние полей напряжений и деформаций в матрице, необходимо установление взаимосвязи между микроструктурой материала и его напряженно-деформированным состоянием. Установление такой взаимосвязи требует определения характеристик процесса массопереноса в среде с микроструктурой, к которым можно отнести эффективные коэффициенты диффузии и связанные с напряженно-деформированным состоянием термодинамические силы, инициирующие дополнительные диффузионные потоки. Непосредственно учет микроструктуры может реализовываться в рамках различных подходов механики сплошных сред. В частности, с помощью методов микромеханики, вводящей в рассмотрение репрезентативный (представительный) объем, содержащий большое количество неоднородностей, а также на базе моделей обобщенных сред, вводящих в рассмотрение дополнительные внутренние степени свободы, что приводит к появлению параметров материала размерности длины. Выбор конкретного подхода позволяет описывать различные эффекты. Применение методов микромеханики позволяет оценивать прямую влияние конкретной микроструктуры на макроскопические свойства материала. Построение моделей обобщенных сред позволяет описывать размерные эффекты, проявляющиеся на масштабах, сопоставимых с характерным размером структурной неоднородности материала.

Цели работы и задачи

Целью работы является анализ влияния микроструктуры деформируемого твердого тела на характеристики процесса массопереноса на основе моде-

лей механики сплошных сред и моделирование диффузии в среде со сложной структурой в рамках континуальных подходов.

Основными задачами работы являются:

- 1) Определение эффективных диффузионных свойств трансверсально-изотропного пористого материала с учетом эффекта сегрегации как частного случая неидеального контакта на границе раздела фаз композита.
- 2) Определение неоднородного напряженно-деформированного состояния длинного цилиндра с учетом взаимодействия структурных неоднородностей материала в рамках микрополярной теории упругости.
- 3) Разработка моделей диффузии с учетом влияния неоднородной микроструктуры деформируемого твердого тела в рамках микромеханики и в рамках микрополярной теории.

Методы исследования

Для анализа влияния микроструктуры деформируемого твердого тела на характеристики процесса массопереноса использовались методы механики сплошных сред. При определении эффективных свойств композита использовались методы гомогенизации. Моделирование поведения материала осуществлялось в рамках классической и микрополярной теории упругости, вводящей в рассмотрение в общем случае независимые вращательные степени свободы и моментные взаимодействия между частицами среды. Для оценки возможности инициации локализованной пластической деформации использовался обобщенный на случай микрополярных сред критерий пластичности Мизеса. При описании диффузионных процессов применялись модели диффузии с учетом влияния напряженно-деформированного состояния. Численное решение в общем случае связанных задач об определении напряженно-деформированного состояния материала и накопления диффундирующего вещества основывалось на применении метода конечных разностей.

Теоретическая и практическая значимость

Диссертационное исследование носит преимущественно теоретический характер. Полученные результаты позволяют описать процесс массопереноса в деформируемых твердых телах со сложной микроструктурой. Построение концентрационных профилей способствует выявлению областей с повышенным содержанием диффундирующего вещества и позволяет оценить локальную концентрацию. Это может оказаться критически важным в случаях, когда даже незначительное увеличение количества примеси оказывает заметное влияние на свойства материала и его поведение на макроуровне.

Полученные в диссертационной работе результаты могут быть использованы на практике, например, при описании водородной деградации металлов и сплавов, поскольку водород оказывает влияние на свойства материала и его поведение на макроуровне даже при малых концентрациях. В частности, предложенный в работе подход позволяет описать малоисследованный поверхностный эффект при насыщении сталей водородом, влияющий на механизмы водородной деградации.

Научная новизна

- Определен вклад изолированной сфероидальной неоднородности в диффузионные свойства материала при наличии скачка концентрации (сегрегации) на границе раздела фаз композита. Наличие скачка впервые учтено на всех этапах решения задачи гомогенизации: при осреднении полей и при нахождении тензора концентрации. Построены границы эффективных диффузионных свойств с учетом эффекта сегрегации. Методы эффективного поля обобщены для учета эффекта сегрегации при определении эффективных коэффициентов диффузии композита.
- Определены эффективные коэффициенты диффузии трансверсально-изотропного пористого материала, анизотропия которого обусловлена формой и ориентацией пор, с учетом эффекта сегрегации.

- Разработан новый подход для описания поверхностных эффектов, основанный на полученном в рамках микрополярной теории упругости решении краевой задачи для длинного цилиндра при задании на боковой поверхности распределенного момента или микроповоротов, моделирующих взаимодействие структурных неоднородностей материала.
- Модели диффузии с учетом влияния напряженно-деформированного состояния уточнены для описания диффузии в твердом теле с неоднородной микроструктурой, учитываемой в рамках микромеханики и в рамках микрополярной теории.
- Разработаны новые численные методы для решения нелинейных связанных задач об определении напряженно-деформированного состояния длинного цилиндра и распределения диффундирующего вещества с учетом неоднородной микроструктуры твердого тела в рамках микромеханики и в рамках микрополярной теории.
- Разработан новый подход для описания наблюдаемого экспериментально поверхностного эффекта при насыщении стальных изделий водородом, при котором практически весь водород аккумулируется в тонком слое порядка характерного размера структурной неоднородности материала.

Основные положения, выносимые на защиту

- Определен вклад изолированной сфероидальной неоднородности в диффузионные свойства материала при наличии скачка концентрации на границе раздела фаз композита, являющегося частным случаем неидеального контакта. Построены границы эффективных диффузионных свойств гетерогенного материала с учетом эффекта сегрегации, заключающегося в скачке концентрации на границе раздела фаз. Методы эффективного поля обобщены для учета эффекта сегрегации.

- Определены эффективные коэффициенты диффузии трансверсально-изотропного пористого материала, анизотропия которого обусловлена формой и ориентацией пор, с учетом характерного для процесса диффузии эффекта сегрегации.
- Получено решение краевой задачи об определении напряженно-деформированного состояния длинного цилиндра в рамках микрополярной теории упругости при задании неклассического граничного условия на боковой поверхности. На основании полученного решения разработан подход к описанию поверхностных эффектов различной природы, связанных с наличием структурной неоднородности материала.
- В рамках микромеханики и микрополярной теории установлена взаимосвязь между микроструктурой материала и его напряженно-деформированным состоянием, расширяющая область применения моделей диффузии, учитывающих влияние полей напряжений и деформаций. Проведен анализ влияния неоднородной микроструктуры пористого материала на процесс диффузии. Проведен анализ влияния неоднородного напряженно-деформированного состояния микрополярного упругого материала на процесс диффузии вблизи поверхности.
- Разработаны подходы для описания локального увеличения концентрации диффундирующего вещества в деформируемом твердом теле с микроструктурой. Разработан подход для описания поверхностного эффекта при диффузии водорода в сталях, при котором практически весь водород аккумулируется в тонком слое порядка характерного размера структурной неоднородности материала.

Достоверность

Достоверность полученных результатов обеспечивается корректностью постановки задач и выбора методов исследования, строгостью применяемого

математического аппарата, выполнимостью предельных переходов к известным решениям, адекватностью физическим представлениям о фактически наблюдаемых явлениях, а также качественным и количественным соответствием экспериментальным данным.

Личный вклад автора

Автором лично получено и проанализировано решение поставленных задач, реализованы проверки предельных переходов к известным случаям. Проведен обзор известных методик, на которых основывалось аналитическое и численное решение. Подготовлены материалы для публикаций в индексируемых журналах.

Апробация работы

Результаты работы докладывались на ежегодных международных летних школах-конференциях “Advanced Problems in Mechanics” (г. Санкт-Петербург, 2019 – 2021 гг.); ежегодных научно-практических конференциях с международным участием “Неделя науки СПбГПУ” (г. Санкт-Петербург, 2018 г., 2019 г.); ежегодных международных конференциях “Corrosion In The Oil&Gas Industry” (г. Санкт-Петербург, 2019 г., 2021 г.); XXII Зимней школе по механике сплошных сред (г. Пермь, 2021 г.); XV Всероссийской школе “Математическое моделирование и биомеханика в современном университете” (пос. Дивноморское, 2021 г.); семинаре кафедры вычислительных методов механики деформируемого тела СПбГУ, 2021 г. (руководитель семинара – д.ф.-м.н. Ю.Г. Пронина); семинарах кафедры механики сплошных сред и материаловедения ТУ Берлина, 2018 г., 2019 г. (руководитель семинара – Prof. Dr. W.H. Müller).

В полном объеме диссертационная работа докладывалась на городском семинаре по механике ИПМаш РАН, 2022 г. (руководитель семинара – д.ф.-м.н., чл.-корр. РАН Д.А. Индейцев); семинарах по прикладным задачам механики ИПМаш РАН, 2021 г., 2022 г. (руководители семинара – д.ф.-м.н., чл.-корр.

РАН А.К. Беляев и д.т.н. В.А. Полянский); семинаре Высшей школы теоретической механики СПбПУ, 2021 г., 2022 г. (руководитель семинара – д.ф.-м.н., чл.-корр. РАН А.М. Кривцов).

Публикации

Результаты диссертационной работы опубликованы в 13 работах [2, 6–8, 16, 26, 27, 38, 72–75, 139], в том числе в 3 работах в изданиях, включенных в перечень ВАК, и в 5 работах в изданиях, входящих в международные базы данных Scopus и Web of Science.

Структура и объём диссертации

Диссертационная работа состоит из введения, трех глав, заключения и списка литературы. Работа изложена на 198 страницах и содержит 34 рисунка и 5 таблиц. Список литературы содержит 174 наименования.

Глава 1

Эффективные свойства пористого материала с учетом сегрегации

Глава посвящена определению эффективных коэффициентов диффузии материала с микротрещинами с учетом характерного для процесса диффузии эффекта сегрегации, заключающегося в скачке концентрации на границе раздела фаз. Коэффициент диффузии определяется классическим образом как количественная характеристика скорости диффузии, равная количеству вещества, проходящего в единицу времени через участок единичной площади при градиенте концентрации, равном единице [121]. Для учета эффекта сегрегации в модели микромеханики вводится коэффициент сегрегации, как это было предложено в работах I. Kaur и Yu. Mishin, J.R. Kalnin, I.V. Belova и G.E. Murch [43, 88, 93] при описании зернограницной диффузии на базе более простых моделей. В главе строятся верхняя и нижняя оценки (границы) эффективных диффузионных свойств с учетом эффекта сегрегации, являющиеся аналогами границ Винера [169] и Хашина-Штрикмана [82, 83] для тепло- и электропроводности. Методы гомогенизации обобщаются для учета наличия скачка концентрации на границе раздела фаз композита.

Одной из основных проблем, возникающих в задачах об определении эффективных свойств гетерогенных материалов, является идентификация микроструктурных параметров, в терминах которых будут выражены искомые макроскопические характеристики материала. Эти параметры должны адек-

ватным образом отражать вклад отдельных неоднородностей в определяемое физическое свойство. В связи с этим, они должны отражать совокупное влияние концентрации неоднородностей, их физических свойств и геометрических характеристик. В работе используется подход, предложенный I. Sevostianov и M. Kachanov [86,87], согласно которому эффективные свойства определяются в терминах микроструктурных параметров, отражающих вклад изолированных неоднородностей с учетом их свойств и геометрии микроструктуры. На основании предложенной в [86, 87] методики в главе выводятся выражения для тензоров вклада в диффузионные свойства, которые, по сути, являются обобщением выражений для тензоров вклада в проводимость, полученных в литературе при рассмотрении идеального контакта на границе раздела фаз композита.

Результаты главы 1 опубликованы в работах [26, 27, 73, 74].

1.1. Постановка задачи гомогенизации

Эффективные диффузионные свойства определяются для поликристалла, содержащего микротрещины. Оценивается влияние микротрещин на свойства материала на макроуровне. Предполагается, что вещество диффундирует по поликристаллу и проходит через поры, частично оседая в них. В поликристалле диффузия происходит как в решетке, так и вдоль границ зерен, при этом коэффициент зернограницной диффузии значительно превышает коэффициент объемной диффузии.

Микротрещины моделируются неоднородностями с изотропным тензором диффузии $\mathbf{D}_1 = D_1 \mathbf{I}$, помещенными в матрицу, представляющую собой, вообще говоря, неоднородную среду, состоящую из зерен с тензором диффузии $\mathbf{D}_B = D_B \mathbf{I}$ и границ зерен с тензором диффузии $\mathbf{D}_{GB} = D_{GB} \mathbf{I}$, см. Рис. 1.1. Задача гомогенизации включает в себя два этапа. На первом “неявном” этапе на основании имеющихся в литературе данных задаются эффективные

свойства матрицы $\mathbf{D}_0$ (ограничимся рассмотрением изотропной матрицы, т.е. $\mathbf{D}_0 = D_0 \mathbf{I}$). На втором “явном” этапе определяются эффективные свойства материала $\mathbf{D}^{eff}$, состоящего из гомогенизированной на первом этапе матрицы и неоднородностей ($\mathbf{D}_1 \gg \mathbf{D}_0$). Такое поэтапное решение задачи, с одной стороны, существенно упрощает анализ. С другой стороны, оно позволяет сконцентрироваться в большей мере на влиянии непосредственно эффекта сегрегации на результаты.

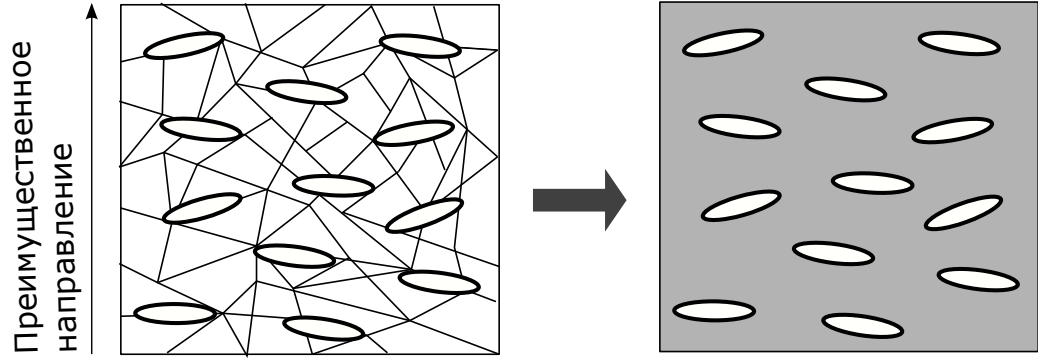


Рис. 1.1. Микромеханическая модель

Из первого этапа решения задачи гомогенизации становятся известными отношения коэффициента объемной диффузии к коэффициенту зернограничной диффузии $\alpha_m = D_B/D_{GB}$ и отношение эффективного коэффициента диффузии поликристалла к коэффициенту объемной диффузии $\alpha_m^{eff} = D_0/D_B$.

Предположим, что коэффициент диффузии вдоль микротрещин совпадает с коэффициентом зернограничной диффузии ($D_1 = D_{GB}$). Тогда отношение коэффициента диффузии матрицы к коэффициенту диффузии неоднородностей определяется следующим образом:

$$\alpha = \frac{D_0}{D_1} = \alpha_m \alpha_m^{eff}. \quad (1.1.1)$$

Рассматриваются микротрещины, имеющие форму сфероидов (эллипсоидов вращения). Сплюснутые сфероиды могут моделировать межзеренные

трещины, вытянутые сфероиды – внутризеренные трещины и, в определенных случаях, трещины по границам нескольких зерен, сферы – отдельные поры и, в грубом приближении, трещины в местах тройного стыка зерен. Отметим, что для более точного учета влияния геометрии микротрещин в поликристалле можно моделировать их с помощью эллипсоидов и суперсфер, что выходит за рамки диссертационной работы.

Учитывается преимущественная ориентация неоднородностей вдоль заданного направления, см. Рис. 1.1 (на рисунке изображены сплюснутые сфероидальные неоднородности). Такой материал является трансверсально-изотропным на макроуровне. Функция плотности распределения по ориентациям задается следующим образом [148]:

$$\psi_{\lambda}(\theta) = \frac{1}{2\pi} \left[(\lambda^2 + 1) e^{-\lambda\theta} + \lambda e^{-\lambda\pi/2} \right], \quad (1.1.2)$$

где нормированная функция ψ_{λ} определена на верхней полусфере единичного радиуса ($0 \leq \theta \leq \pi/2$). Параметр разброса λ изменяется в диапазоне от нуля до бесконечности, что соответствует полностью произвольному и строго параллельному распределению неоднородностей по ориентациям.

Предполагается, что диффузия внутри неоднородностей и внутри матрицы, а также в гомогенизированном материале удовлетворяет классическому линейному закону Фика, связывающему диффузионный поток с градиентом концентрации.

Для учета характерного для процесса диффузии эффекта сегрегации рассматривается “неидеальный” контакт на границе раздела фаз Γ . Условия на границе раздела матрицы (+) и неоднородности (–) вводятся в соответствии с [43, 88]:

$$D_0 \frac{\partial c(x)}{\partial n_{\Gamma}}(x) \Big|_{x \rightarrow \Gamma+} = D_1 \frac{\partial c(x)}{\partial n_{\Gamma}}(x) \Big|_{x \rightarrow \Gamma-}, \quad (1.1.3)$$

$$c(x)|_{x \rightarrow \Gamma+} = s c(x)|_{x \rightarrow \Gamma-}, \quad (1.1.4)$$

где c – концентрация, s – параметр сегрегации, $\mathbf{n}_\Gamma$ – внешняя нормаль к поверхности Γ (вектор $\mathbf{n}_\Gamma$ направлен от неоднородности к матрице). Условие (1.1.3) означает непрерывность нормальной компоненты потока диффундирующего вещества через границу раздела двух фаз; условие (1.1.4) определяет постоянный скачок концентрации (частный случай неидеального контакта).

При отсутствии эффекта сегрегации параметр сегрегации $s = 1$. В этом случае можно провести полную аналогию между задачами диффузии и проводимости и определять эффективные коэффициенты диффузии на основании известных из литературы выражений для эффективной тепло- или электропроводности. В случаях, когда диффундирующее вещество может частично оседать на границе раздела фаз или внутри неоднородности, параметр сегрегации соответственно больше или меньше единицы. Известно, что диффундирующее вещество оседает по границам зерен, внутри микротрещин и прочих несплошностей. Таким образом, значение коэффициента сегрегации определяется в том числе и микромеханической моделью композита: тем, какая фаза представляет собой матрицу, а какая – неоднородность. В частности, при рассмотрении микротрещин в качестве неоднородностей $s < 1$.

1.2. Тензоры вклада неоднородности с неидеальным контактом в диффузионные свойства

Определим вклад изолированной неоднородности, характеризующейся изотропным тензором диффузии $\mathbf{D}_1$, в свойства материала, матрица которого характеризуется изотропным тензором диффузии $\mathbf{D}_0$. Для этого рассмотрим репрезентативный (представительный) объем V , содержащий изолированную неоднородность объемом $V_1 \ll V$ (см. Рис. 1.2).

Определим средние по $V = V_0 \cup V_1$ (V_0 – объем, занимаемый матрицей)

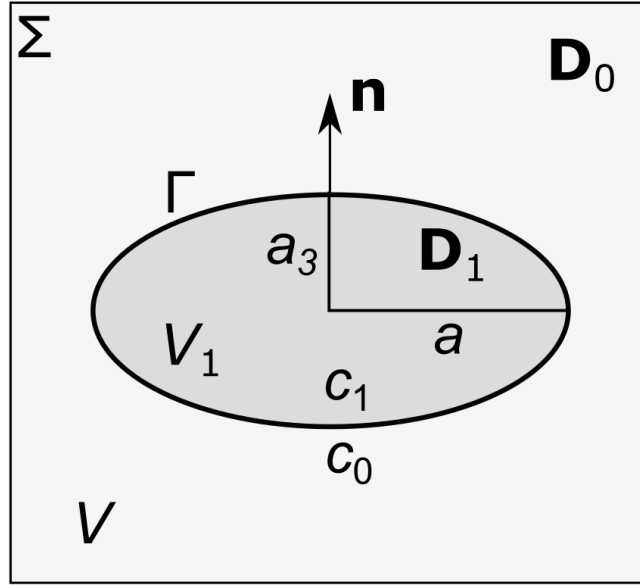


Рис. 1.2. Задача гомогенизации

значения градиента концентрации и потока. Средний градиент концентрации может быть определен через значение концентрации на границе Σ репрезентативного объема V как

$$\langle \nabla c \rangle_V = \frac{1}{V} \int_V \nabla c dV = \frac{1}{V} \int_{\Sigma} \mathbf{n}_{\Sigma} c_0 d\Sigma, \quad (1.2.1)$$

∇ – набла-оператор, $\mathbf{n}_{\Sigma}$ – внешняя нормаль к поверхности Σ .

Дополняя поверхностный интеграл по внешней границе репрезентативного объема до интегралов по границам всех областей композита и учитывая, что объем V_0 ограничен поверхностями Σ (с нормалью $+\mathbf{n}_{\Sigma}$) и Γ (с нормалью $-\mathbf{n}_{\Gamma}$), а объем V_1 – поверхностью Γ (с нормалью $+\mathbf{n}_{\Gamma}$), а также применяя теорему Остроградского-Гаусса, получим

$$\begin{aligned} \langle \nabla c \rangle_V &= \frac{1}{V} \left[\int_{\Sigma} \mathbf{n}_{\Sigma} c_0 d\Sigma \mp \int_{\Gamma} \mathbf{n}_{\Gamma} c_0 d\Gamma \pm \int_{\Gamma} \mathbf{n}_{\Gamma} c_1 d\Gamma \right] = \\ &= \frac{1}{V} \left[\int_{V_0} \nabla c dV_0 + \int_{V_1} \nabla c dV_1 + \int_{\Gamma} \mathbf{n}_{\Gamma} (c_0 - c_1) d\Gamma \right] = \\ &= \frac{V_0}{V} \langle \nabla c \rangle_{V_0} + \frac{V_1}{V} \langle \nabla c \rangle_{V_1} + \int_{\Gamma} \mathbf{n}_{\Gamma} (c_0 - c_1) d\Gamma. \end{aligned} \quad (1.2.2)$$

В случае идеального контакта на границе раздела фаз композита последнее слагаемое обращается в ноль, и задача определения эффективных диффузионных свойств полностью аналогична задаче определения эффективной проводимости.

С учетом условия (1.1.4) на границе раздела матрица/неоднородность, выражение (1.2.2) сведется к

$$\begin{aligned}\langle \nabla c \rangle_V &= \frac{V_0}{V} \langle \nabla c \rangle_{V_0} + \frac{V_1}{V} \langle \nabla c \rangle_{V_1} + (s-1) \frac{V_1}{V} \langle \nabla c \rangle_{V_1} = \\ &= \frac{V_0}{V} \langle \nabla c \rangle_{V_0} + s \frac{V_1}{V} \langle \nabla c \rangle_{V_1} = \left(1 - \frac{V_1}{V}\right) \langle \nabla c \rangle_{V_0} + s \frac{V_1}{V} \langle \nabla c \rangle_{V_1}.\end{aligned}\quad (1.2.3)$$

Диффузионный поток непрерывен при переходе через внутреннюю границу Γ , поэтому

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{J} \rangle_V &= \frac{1}{V} \int_V \mathbf{J} dV = \frac{1}{V} \left[\int_{V_0} \mathbf{J} dV_0 + \int_{V_1} \mathbf{J} dV_1 \right] = \\ &= \frac{V_0}{V} \langle \mathbf{J} \rangle_{V_0} + \frac{V_1}{V} \langle \mathbf{J} \rangle_{V_1} = \left(1 - \frac{V_1}{V}\right) \langle \mathbf{J} \rangle_{V_0} + \frac{V_1}{V} \langle \mathbf{J} \rangle_{V_1}.\end{aligned}\quad (1.2.4)$$

На границе репрезентативного объема в соответствии с условием Хилла [84] задаются однородные граничные условия (такие условия, при которых в случае отсутствия неоднородности поля внутри репрезентативного объема будут однородны). Если на границе задается концентрация, то независимо от состава и микроструктуры репрезентативного объема, при отсутствии внутренних источников среднее по объему значение градиента концентрации полностью определяется его значением на границе, а средняя величина потока зависит от микроструктуры материала. Наоборот, в случае задания на границе потока, независимо от состава и микроструктуры репрезентативного объема, при отсутствии внутренних источников средний по объему поток полностью определяется его значением на границе, тогда как средний градиент концентрации зависит от микроструктуры.

Тогда, если на границе Σ задана концентрация ($c(x) = \mathbf{G}^0 \cdot \mathbf{x}$), то

$$\langle \nabla c \rangle_V = \mathbf{G}^0. \quad (1.2.5)$$

Поскольку и матрица, и неоднородность подчиняются линейному закону Фика, с учетом (1.2.3) получим следующее выражение для осредненного по V потока:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{J} \rangle_V &= - \left(1 - \frac{V_1}{V} \right) \mathbf{D}_0 \cdot \langle \nabla c \rangle_{V_0} - \frac{V_1}{V} \mathbf{D}_1 \cdot \langle \nabla c \rangle_{V_1} = \\ &= -\mathbf{D}_0 \cdot \mathbf{G}^0 - \frac{V_1}{V} (\mathbf{D}_1 - s\mathbf{D}_0) \cdot \langle \nabla c \rangle_{V_1}. \end{aligned} \quad (1.2.6)$$

Введем в рассмотрение тензор концентрации $\mathbf{\Lambda}_c$, выражающий поле внутри неоднородности через заданное на границе репрезентативного объема:

$$\langle \nabla c \rangle_{V_1} = \mathbf{\Lambda}_c \cdot \mathbf{G}^0. \quad (1.2.7)$$

Тогда окончательно получим

$$\langle \mathbf{J} \rangle_V = - \left[\mathbf{D}_0 + \frac{V_1}{V} (\mathbf{D}_1 - s\mathbf{D}_0) \cdot \mathbf{\Lambda}_c \right] \cdot \mathbf{G}^0 = - \left[\mathbf{D}_0 + \frac{V_1}{V} \mathbf{H}^D \right] \cdot \mathbf{G}^0. \quad (1.2.8)$$

Последнее слагаемое в скобках определяет вклад неоднородности в диффузионные свойства гетерогенного материала, а тензор

$$\mathbf{H}^D = (\mathbf{D}_1 - s\mathbf{D}_0) \cdot \mathbf{\Lambda}_c \quad (1.2.9)$$

называется тензором вклада в диффузию.

Если на границе Σ задана не концентрация, а поток $J_n = \mathbf{J}^0 \cdot \mathbf{n}$, то

$$\langle \mathbf{J} \rangle_V = \mathbf{J}^0, \quad (1.2.10)$$

а средний градиент концентрации с учетом линейного закона Фика и формулы (1.2.4) определяется следующим образом:

$$\begin{aligned}\langle \nabla c \rangle_V &= - \left(1 - \frac{V_1}{V} \right) \mathbf{D}_0^{-1} \cdot \langle \mathbf{J} \rangle_{V_0} - s \frac{V_1}{V} \mathbf{D}_1^{-1} \cdot \langle \mathbf{J} \rangle_{V_1} = \\ &= -\mathbf{D}_0^{-1} \cdot \mathbf{J}^0 - \frac{V_1}{V} (s \mathbf{D}_1^{-1} - \mathbf{D}_0^{-1}) \cdot \langle \mathbf{J} \rangle_{V_1}.\end{aligned}\quad (1.2.11)$$

Введя в рассмотрение тензор $\mathbf{\Lambda}_j$ как

$$\langle \mathbf{J} \rangle_{V_1} = \mathbf{\Lambda}_j \cdot \mathbf{J}^0, \quad (1.2.12)$$

получим окончательно следующее выражение для осредненного по репрезентативному объему градиента концентрации:

$$\begin{aligned}\langle \nabla c \rangle_V &= - \left[\mathbf{D}_0^{-1} + \frac{V_1}{V} (s \mathbf{D}_1^{-1} - \mathbf{D}_0^{-1}) \cdot \mathbf{\Lambda}_j \right] \cdot \mathbf{J}^0 = \\ &= - \left[\mathbf{D}_0^{-1} + \frac{V_1}{V} \mathbf{H}^{DR} \right] \cdot \mathbf{J}^0,\end{aligned}\quad (1.2.13)$$

где по аналогии с задачей проводимости тензор

$$\mathbf{H}^{DR} = (s \mathbf{D}_1^{-1} - \mathbf{D}_0^{-1}) \cdot \mathbf{\Lambda}_j \quad (1.2.14)$$

называется тензором вклада в сопротивляемость.

Установим соотношение между тензором вклада в диффузию и тензором вклада в сопротивляемость диффузии, установив предварительно связь между тензорами $\mathbf{\Lambda}_c$ и $\mathbf{\Lambda}_j$. Средний по объему неоднородности поток, с одной стороны, выражается через значение на границе репрезентативного объема в соответствии с формулой (1.2.12), а с другой стороны – связан со средним по объему неоднородности градиентом концентрации законом Фика:

$$\langle \mathbf{J} \rangle_{V_1} = -\mathbf{D}_1 \cdot \langle \nabla c \rangle_{V_1} = \mathbf{D}_1 \cdot \mathbf{\Lambda}_c \cdot \mathbf{D}_0^{-1} \cdot \mathbf{J}^0. \quad (1.2.15)$$

Здесь учтено, что $\langle \nabla c \rangle_{V_1}$ может быть выражен через поле на границе, которое, в свою очередь, определяется законом Фика.

Сравнение формул (1.2.12) и (1.2.15) устанавливает следующую связь между тензорами $\mathbf{\Lambda}_c$ и $\mathbf{\Lambda}_j$:

$$\mathbf{\Lambda}_j = \mathbf{D}_1 \cdot \mathbf{\Lambda}_c \cdot \mathbf{D}_0^{-1}. \quad (1.2.16)$$

С учетом формул (1.2.14), (1.2.16), (1.2.9) получим следующее соотношение между тензорами вклада:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}^{DR} &= (s\mathbf{D}_1^{-1} - \mathbf{D}_0^{-1}) \cdot \mathbf{D}_1 \cdot \mathbf{\Lambda}_c \cdot \mathbf{D}_0^{-1} = \\ &= (s\mathbf{I} - \mathbf{D}_0^{-1} \cdot \mathbf{D}_1) \cdot \mathbf{\Lambda}_c \cdot \mathbf{D}_0^{-1} = \\ &= \mathbf{D}_0^{-1} \cdot (s\mathbf{D}_0 - \mathbf{D}_1) \cdot \mathbf{\Lambda}_c \cdot \mathbf{D}_0^{-1} = -\mathbf{D}_0^{-1} \cdot \mathbf{H}^D \cdot \mathbf{D}_0^{-1} \end{aligned} \quad (1.2.17)$$

В случае изотропной неоднородности, помещенной в изотропную матрицу, из (1.2.16) следует

$$\mathbf{\Lambda}_j = \frac{D_1}{D_0} \mathbf{\Lambda}_c, \quad (1.2.18)$$

а из (1.2.17) – соотношение между тензорами вклада

$$\mathbf{H}^{DR} = -\frac{1}{D_0^2} \mathbf{H}^D. \quad (1.2.19)$$

Выражение для тензора концентрации $\mathbf{\Lambda}_c$ может быть получено в явном виде на основании решения задачи Эшелби только для эллипсоидальной неоднородности. Задача Эшелби для электропроводности была решена Н. Fricke [71]. Это решение может быть использовано для определения эффективных коэффициентов диффузии в случае неоднородности с идеальным контактом. A.G. Knyazeva et al. [96] обобщили решение Фрике для учета сегрегации при рассмотрении сфероидальной неоднородности. Следуя [71] и учитывая условия (1.1.3), (1.1.4) на границе раздела фаз композита (рассматривая неидеальный контакт), можно получить следующее выражение

для тензора концентрации эллипсоидальной неоднородности:

$$\begin{aligned} \mathbf{\Lambda}_c = & \frac{1}{s} \frac{2}{2 + L_1 a_1 a_2 a_3 \left(\frac{D_1}{s D_0} - 1 \right)} \mathbf{e}_1 \mathbf{e}_1 + \\ & + \frac{1}{s} \frac{2}{2 + L_2 a_1 a_2 a_3 \left(\frac{D_1}{s D_0} - 1 \right)} \mathbf{e}_2 \mathbf{e}_2 + \frac{1}{s} \frac{2}{2 + L_3 a_1 a_2 a_3 \left(\frac{D_1}{s D_0} - 1 \right)} \mathbf{e}_3 \mathbf{e}_3, \end{aligned} \quad (1.2.20)$$

где L_1, L_2, L_3 – эллиптические интегралы, a_1, a_2, a_3 – полуоси эллипсоида, $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$ – орты главных осей эллипсоида.

Тензор концентрации может быть найден иначе через тензор Хилла $\mathbf{P}$, который определяется выражением [87]

$$\mathbf{P} = \left(\nabla \int_{V_1} \nabla' G(x - x') dx' \right)^S, \quad (1.2.21)$$

где индекс S означает симметричную часть тензора, G – функция Грина для концентрации. Выражение для тензора Хилла может быть получено в явном виде также только в случае эллипсоидальной неоднородности.

Используя в соответствии с [91] в задаче Эшелби потенциал двойного слоя, моделирующий скачок концентрации на границе раздела фаз, получим следующее выражение для тензора концентрации:

$$\mathbf{\Lambda}_c = [s\mathbf{I} + \mathbf{P} \cdot (\mathbf{D}_1 - s\mathbf{D}_0)]^{-1}. \quad (1.2.22)$$

Тогда тензор вклада в диффузию можно определить через тензор Хилла по следующей формуле:

$$\mathbf{H}^D = \left[\left(\frac{\mathbf{D}_1}{s} - \mathbf{D}_0 \right)^{-1} + \mathbf{P} \right]^{-1}. \quad (1.2.23)$$

Учитывая связь между первым тензором Хилла $\mathbf{P}$ и вторым тензором

Хилла $\mathbf{Q}$ [87]

$$\mathbf{Q} = \mathbf{D}_0 \cdot (\mathbf{I} - \mathbf{P} \cdot \mathbf{D}_0),$$

откуда следует $\mathbf{P} = \mathbf{D}_0^{-1} \cdot [\mathbf{I} - \mathbf{Q} \cdot \mathbf{D}_0^{-1}]$, и связь между тензорами $\mathbf{\Lambda}_c$ и $\mathbf{\Lambda}_j$, определяемую формулой (1.2.16), получим следующее представление для тензора вклада в сопротивляемость через второй тензор Хилла:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}^{DR} &= \left(\left(\frac{\mathbf{D}_1}{s} \right)^{-1} - \mathbf{D}_0^{-1} \right) \cdot \mathbf{\Lambda}_j = \left(\left(\frac{\mathbf{D}_1}{s} \right)^{-1} - \mathbf{D}_0^{-1} \right) \cdot \mathbf{D}_1 \cdot \mathbf{\Lambda}_c \cdot \mathbf{D}_0^{-1} = \\ &= \left(\left(\frac{\mathbf{D}_1}{s} \right)^{-1} - \mathbf{D}_0^{-1} \right) \cdot \mathbf{D}_1 \cdot [s\mathbf{I} + \mathbf{P} \cdot (\mathbf{D}_1 - s\mathbf{D}_0)]^{-1} \cdot \mathbf{D}_0^{-1} = \\ &= \left(\left(\frac{\mathbf{D}_1}{s} \right)^{-1} - \mathbf{D}_0^{-1} \right) \cdot \left[\mathbf{I} + \mathbf{Q} \cdot \left(\left(\frac{\mathbf{D}_1}{s} \right)^{-1} - \mathbf{D}_0^{-1} \right) \right]^{-1} = \\ &= \left[\left(\left(\frac{\mathbf{D}_1}{s} \right)^{-1} - \mathbf{D}_0^{-1} \right)^{-1} + \mathbf{Q} \right]^{-1}. \end{aligned} \quad (1.2.24)$$

Введем теперь в рассмотрение эквивалентную неоднородность с идеальным контактом на границе раздела с матрицей. Определим, каким должен быть тензор вклада эквивалентной неоднородности $\mathbf{D}_1^*$, чтобы она давала такой же вклад в эффективные свойства, как и неоднородность с неидеальным контактом. С учетом формулы (1.2.23), имеет место следующее равенство:

$$\mathbf{H}^D = \left[\left(\frac{\mathbf{D}_1}{s} - \mathbf{D}_0 \right)^{-1} + \mathbf{P} \right]^{-1} = \left[(\mathbf{D}_1^* - \mathbf{D}_0)^{-1} + \mathbf{P} \right]^{-1}, \quad (1.2.25)$$

откуда следует, что эквивалентная неоднородность обладает свойствами

$$\mathbf{D}_1^* = \frac{\mathbf{D}_1}{s}. \quad (1.2.26)$$

Таким образом, уменьшение параметра сегрегации (увеличение скачка концентрации) эквивалентно увеличению проницаемости неоднородности для

диффундирующего вещества.

В завершение раздела определим вклад сфероидальной неоднородности в эффективные свойства. Примем для определенности, что $a_1 = a_2 = a$, $\mathbf{n} = \mathbf{e}_3$ – орт оси симметрии эллипсоида вращения (см. Рис. 1.2), и введем в рассмотрение отношение длин полуосей сфероида $\gamma = a_3/a$. Эллиптические интегралы в (1.2.20) примут вид [87]:

$$L_1 = L_2 = \frac{2f_0}{a^2 a_3}, L_3 = \frac{2(1 - a^2 L_1)}{a^2 a_3} = \frac{2(1 - 2f_0)}{a^2 a_3}, \quad (1.2.27)$$

где функция

$$f_0 = f_0(\gamma) = \frac{1 - g}{2(1 - \gamma^{-2})}, \quad (1.2.28)$$

здесь

$$g = g(\gamma) = \begin{cases} \frac{1}{\gamma\sqrt{1-\gamma^2}} \arctan \frac{\sqrt{1-\gamma^2}}{\gamma}, & \gamma \leq 1 \\ \frac{1}{2\gamma\sqrt{\gamma^2-1}} \ln \left(\frac{\gamma+\sqrt{\gamma^2-1}}{\gamma-\sqrt{\gamma^2-1}} \right), & \gamma \geq 1. \end{cases} \quad (1.2.29)$$

Тогда тензор концентрации сфероидальной неоднородности примет вид [96]:

$$\mathbf{\Lambda}_c = \frac{D_0}{sD_0 + f_0(D_1 - sD_0)} \tilde{\boldsymbol{\theta}} + \frac{D_0}{D_1 - 2f_0(D_1 - sD_0)} \mathbf{nn}, \quad (1.2.30)$$

где $\tilde{\boldsymbol{\theta}} = \mathbf{I} - \mathbf{nn}$.

Тензор Хилла сфероида определяется как [87]

$$\mathbf{P} = \frac{1}{D_0} \left(f_0 \tilde{\boldsymbol{\theta}} + (1 - 2f_0) \mathbf{nn} \right). \quad (1.2.31)$$

В результате, выражение для тензора концентрации сфероидальной неоднородности, определяемое формулой (1.2.22), совпадает с (1.2.30). Таким образом, тензор концентрации был получен независимо двумя способами.

Тензор вклада сфероидальной неоднородности с неидеальным контактом, определяемый как формулой (1.2.9) через тензор концентрации, так и фор-

мулой (1.2.23) через тензор Хилла, принимает в обоих случаях вид

$$\mathbf{H}^D = D_0 \left[B_1 \tilde{\boldsymbol{\theta}} + B_2 \mathbf{nn} \right], \quad (1.2.32)$$

где

$$B_1 = \frac{D_1 - sD_0}{sD_0 + f_0(D_1 - sD_0)}, \quad B_2 = \frac{D_1 - sD_0}{D_1 - 2f_0(D_1 - sD_0)}. \quad (1.2.33)$$

При рассмотрении в качестве неоднородностей пор удобно ввести отношение коэффициентов диффузии матрицы и неоднородности как $\alpha = D_0/D_1$ и определить коэффициенты B_1 , B_2 следующим образом:

$$B_1 = \frac{1 - s\alpha}{s\alpha + f_0(1 - s\alpha)}, \quad B_2 = \frac{1 - s\alpha}{1 - 2f_0(1 - s\alpha)}. \quad (1.2.34)$$

Тогда уменьшение $s\alpha = sD_0/D_1 = D_0/D_1^*$ при фиксированном коэффициенте диффузии матрицы D_0 имеет место при увеличении коэффициента диффузии эквивалентной неоднородности D_1^* . В предельном случае при $D_1^* \rightarrow \infty$, $s\alpha = 0$. При этом $D_1^* \rightarrow \infty$ как в случае $D_1 \rightarrow \infty$, так и в случае $s \rightarrow 0$.

1.3. Эффективные диффузионные свойства

В случае материала с множественными неоднородностями суммы их тензоров вклада могут рассматриваться в качестве микроструктурных параметров, в терминах которых определяются эффективные свойства гетерогенной среды. Обобщим используемые в литературе методы гомогенизации в терминах тензоров вклада для учета эффекта сегрегации при диффузии.

При определении эффективного тензора диффузии будем исходить из того, что гомогенизированный материал удовлетворяет линейному закону Фика

$$\langle \mathbf{J} \rangle_V = -\mathbf{D}^{eff} \cdot \langle \nabla c \rangle_V. \quad (1.3.1)$$

1.3.1. Обобщенные методы гомогенизации

Итак, вклад отдельной изолированной определяется через тензор вклада в диффузию $\mathbf{H}^D$ или через тензор вклада в сопротивляемость диффузии $\mathbf{H}^{DR}$. В рамках метода гомогенизации без учета взаимодействия неоднородностей (NIA – Non-Interaction Approximation) неоднородности рассматриваются как изолированные, взаимодействием между ними пренебрегается. Дополнительный поток при заданной на границе репрезентативного объема концентрации можно определить как [87]

$$\delta \mathbf{J} = - \sum_i \frac{V_i}{V} \mathbf{H}_i^D \cdot \mathbf{G}^0, \quad (1.3.2)$$

где i – количество неоднородностей.

Альтернативно можно рассмотреть дополнительный градиент концентрации, инициированный множественными неоднородностями, при заданном на границе потоке [87, 96]:

$$\delta \nabla c = - \sum_i \frac{V_i}{V} \mathbf{H}_i^{DR} \cdot \mathbf{J}^0. \quad (1.3.3)$$

С учетом (1.3.1), (1.3.2), (1.3.3), эффективный тензор диффузии может быть определен одним из двух способов:

$$\mathbf{D}^{eff} = \mathbf{D}_0 + \frac{1}{V} \sum_i V_i \mathbf{H}_i^D, \quad (1.3.4)$$

$$\mathbf{D}^{eff} = \left\{ \mathbf{D}_0^{-1} + \frac{1}{V} \sum_i V_i \mathbf{H}_i^{DR} \right\}^{-1}. \quad (1.3.5)$$

Для определения эффективных свойств с учетом взаимовлияния неоднородностей могут быть использованы различные самосогласованные схемы. В случае, когда анизотропия материала связана не с анизотропией мат-

рицы/неоднородностей, а с определенной ориентацией неоднородностей, используются методы эффективного поля, в которых изолированные неоднородности помещаются в эффективное поле, в общем случае отличное от приложенного на границе репрезентативного объема [130]. Рассмотрим далее схемы Мори-Танака, Максвелла и Канауна-Левина и обобщим их для учета эффекта сегрегации. Следуя [86, 87], представим схемы в терминах тензоров вклада.

Обратимся сперва к схеме гомогенизации, предложенной Т. Mori и К. Танака [129] и уточненной Y. Benveniste [45]. При использовании данной схемы предполагается, что каждая неоднородность помещается в однородное поле, равное среднему по матрице.

Пусть на границе репрезентативного объема V задана концентрация. Тогда с учетом формулы (1.2.3) получим

$$\langle \nabla c \rangle_V = \mathbf{G}^0 = s \frac{1}{V} \sum_i V_i \langle \nabla c \rangle_i + (1 - \phi) \langle \nabla c \rangle_m, \quad (1.3.6)$$

где $\phi = \sum_i V_i/V$ – объемная доля неоднородностей, $\langle \cdot \rangle_i$ и $\langle \cdot \rangle_m$ обозначают осреднение по объему i -ой неоднородности и по объему матрицы соответственно.

Согласно идее метода Мори-Танака, среднее поле внутри неоднородности определяется как

$$\langle \nabla c \rangle_i = (\mathbf{\Lambda}_c)_i \cdot \langle \nabla c \rangle_m = (\mathbf{\Lambda}_c)_i \cdot \mathbf{G}^{eff}, \quad (1.3.7)$$

где $\mathbf{G}^{eff} = \langle \nabla c \rangle_m$ является эффективным полем.

Тогда выражение (1.3.6) можно представить в следующем виде:

$$\mathbf{G}^0 = \left[s \frac{1}{V} \sum_i V_i (\mathbf{\Lambda}_c)_i + (1 - \phi) \mathbf{I} \right] \cdot \mathbf{G}^{eff}, \quad (1.3.8)$$

и, следовательно, эффективное поле определяется как

$$\mathbf{G}^{eff} = \left[s \frac{1}{V} \sum_i V_i (\mathbf{\Lambda}_c)_i + (1 - \phi) \mathbf{I} \right]^{-1} \cdot \mathbf{G}^0. \quad (1.3.9)$$

С учетом формулы (1.2.4) для случая единичной изолированной неоднородности и с учетом закона Фика

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{J} \rangle_V &= \frac{1}{V} \sum_i V_i \langle \mathbf{J} \rangle_i + (1 - \phi) \langle \mathbf{J} \rangle_m = \\ &= -\frac{1}{V} \sum_i V_i \mathbf{D}_i \cdot \langle \nabla c \rangle_i - (1 - \phi) \mathbf{D}_0 \cdot \langle \nabla c \rangle_m. \end{aligned} \quad (1.3.10)$$

С учетом (1.3.7) и (1.3.6) получим

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{J} \rangle_V &= -\frac{1}{V} \sum_i V_i \mathbf{D}_i \cdot \langle \nabla c \rangle_i - \mathbf{D}_0 \cdot \left[\mathbf{G}^0 - s \frac{1}{V} \sum_i V_i \langle \nabla c \rangle_i \right] = \\ &= -\mathbf{D}_0 \cdot \mathbf{G}^0 - \frac{1}{V} \sum_i V_i (\mathbf{D}_i - s \mathbf{D}_0) \cdot \langle \nabla c \rangle_i = \\ &= - \left[\mathbf{D}_0 \cdot \mathbf{G}^0 + \frac{1}{V} \sum_i V_i (\mathbf{D}_i - s \mathbf{D}_0) \cdot (\mathbf{\Lambda}_c)_i \cdot \mathbf{G}^{eff} \right] = \\ &= - \left[\mathbf{D}_0 + \left(\frac{1}{V} \sum_i V_i (\mathbf{D}_i - s \mathbf{D}_0) \cdot (\mathbf{\Lambda}_c)_i \right) \cdot \right. \\ &\quad \left. \left(s \frac{1}{V} \sum_i V_i (\mathbf{\Lambda}_c)_i + (1 - \phi) \mathbf{I} \right)^{-1} \right] \cdot \mathbf{G}^0. \end{aligned} \quad (1.3.11)$$

Поскольку $\mathbf{G}^0 = \langle \nabla c \rangle_V$, в соответствии с законом Фика в последнем равенстве в квадратных скобках фигурирует эффективный тензор диффузии $\mathbf{D}^{eff}$. Выражая тензор концентрации $(\mathbf{\Lambda}_c)_i$ через тензор вклада неоднородности в диффузию в соответствии с формулой (1.2.9), получим следующее

выражение для эффективного тензора диффузии:

$$\begin{aligned}\mathbf{D}^{eff} &= \mathbf{D}_0 + \frac{1}{V} \sum_i V_i \mathbf{H}_i^D. \\ \left(s \frac{1}{V} \sum_i V_i (\mathbf{D}_i - s \mathbf{D}_0)^{-1} \cdot \mathbf{H}_i^D + (1 - \phi) \mathbf{I} \right)^{-1} &= \\ = \mathbf{D}_0 + \frac{1}{V} \sum_i V_i \mathbf{H}_i^D \cdot \left(\left(\frac{\mathbf{D}_1}{s} - \mathbf{D}_0 \right)^{-1} \cdot \frac{1}{V} \sum_i V_i \mathbf{H}_i^D + (1 - \phi) \mathbf{I} \right)^{-1}.\end{aligned}\quad (1.3.12)$$

Перепишем схему гомогенизации Мори-Танака в терминах тензоров вклада в сопротивляемость. Пусть на границе репрезентативного объема V теперь задан поток $\mathbf{J}^0$. Тогда

$$\langle \mathbf{J} \rangle_V = \mathbf{J}^0 = \frac{1}{V} \sum_i V_i \langle \mathbf{J} \rangle_i + (1 - \phi) \langle \mathbf{J} \rangle_m. \quad (1.3.13)$$

Среднее поле внутри неоднородности определяется через среднее по матрице, равное эффективному, как

$$\langle \mathbf{J} \rangle_i = (\mathbf{\Lambda}_j)_i \cdot \langle \mathbf{J} \rangle_m = (\mathbf{\Lambda}_j)_i \cdot \mathbf{J}^{eff}. \quad (1.3.14)$$

Тогда выражение (1.3.13) примет вид:

$$\mathbf{J}^0 = \left[\frac{1}{V} \sum_i V_i (\mathbf{\Lambda}_j)_i + (1 - \phi) \mathbf{I} \right] \cdot \mathbf{J}^{eff}, \quad (1.3.15)$$

и, следовательно, эффективное поле определяется как

$$\mathbf{J}^{eff} = \left[\frac{1}{V} \sum_i V_i (\mathbf{\Lambda}_j)_i + (1 - \phi) \mathbf{I} \right]^{-1} \cdot \mathbf{J}^0. \quad (1.3.16)$$

С учетом формулы (1.2.3) для случая единичной изолированной неоднородности и с учетом закона Фика, градиент концентрации, осредненный по

репрезентативному объему, может быть представлен следующим образом:

$$\begin{aligned}
\langle \nabla c \rangle_V &= s \frac{1}{V} \sum_i V_i \langle \nabla c \rangle_i + (1 - \phi) \langle \nabla c \rangle_m = \\
&= -s \frac{1}{V} \sum_i V_i \mathbf{D}_i^{-1} \cdot \langle \mathbf{J} \rangle_i - (1 - \phi) \mathbf{D}_0^{-1} \cdot \langle \mathbf{J} \rangle_m.
\end{aligned} \tag{1.3.17}$$

С учетом выражений (1.3.14), (1.3.13) получим

$$\begin{aligned}
\langle \nabla c \rangle_V &= -s \frac{1}{V} \sum_i V_i \mathbf{D}_i^{-1} \cdot \langle \mathbf{J} \rangle_i - \mathbf{D}_0^{-1} \cdot \left[\mathbf{J}^0 - \frac{1}{V} \sum_i V_i \langle \mathbf{J} \rangle_i \right] = \\
&= -\mathbf{D}_0^{-1} \cdot \mathbf{J}^0 - \frac{1}{V} \sum_i V_i (s \mathbf{D}_i^{-1} - \mathbf{D}_0^{-1}) \cdot \langle \mathbf{J} \rangle_i = \\
&= - \left[\mathbf{D}_0^{-1} \cdot \mathbf{J}^0 + \frac{1}{V} \sum_i V_i (s \mathbf{D}_i^{-1} - \mathbf{D}_0^{-1}) \cdot (\boldsymbol{\Lambda}_j)_i \cdot \mathbf{J}^{eff} \right] = \\
&= - \left[\mathbf{D}_0^{-1} + \left(\frac{1}{V} \sum_i V_i (s \mathbf{D}_i^{-1} - \mathbf{D}_0^{-1}) \cdot (\boldsymbol{\Lambda}_j)_i \right) \cdot \right. \\
&\quad \left. \left(\frac{1}{V} \sum_i V_i (\boldsymbol{\Lambda}_j)_i + (1 - \phi) \mathbf{I} \right)^{-1} \right] \cdot \mathbf{J}^0,
\end{aligned} \tag{1.3.18}$$

где в последнем равенстве в квадратных скобках фигурирует обратный эффективный тензор диффузии $(\mathbf{D}^{eff})^{-1}$.

Выражая тензор $(\boldsymbol{\Lambda}_j)_i$ через тензор вклада неоднородности в сопротивляемость в соответствии с формулой (1.2.14), получим следующее выражение

для эффективного тензора диффузии:

$$\begin{aligned}
\mathbf{D}^{eff} &= \left\{ \mathbf{D}_0^{-1} + \frac{1}{V} \sum_i V_i \mathbf{H}_i^{DR} \cdot \right. \\
&\quad \left. \left(\frac{1}{V} \sum_i V_i (s \mathbf{D}_i^{-1} - \mathbf{D}_0^{-1})^{-1} \cdot \mathbf{H}_i^{DR} + (1 - \phi) \mathbf{I} \right)^{-1} \right\}^{-1} = \\
&= \left\{ \mathbf{D}_0^{-1} + \frac{1}{V} \sum_i V_i \mathbf{H}_i^{DR} \cdot \right. \\
&\quad \left. \left[\left(\left(\frac{\mathbf{D}_1}{s} \right)^{-1} - \mathbf{D}_0^{-1} \right)^{-1} \cdot \frac{1}{V} \sum_i V_i \mathbf{H}_i^{DR} + (1 - \phi) \mathbf{I} \right]^{-1} \right\}^{-1}.
\end{aligned} \tag{1.3.19}$$

Перейдем к рассмотрению схемы Максвелла. Согласно основной гипотезе метода [115,149], эффективные свойства определяются исходя из предположения о том, что возмущение поля в удаленной точке, создаваемое множеством изолированных неоднородностей, совпадает с возмущением поля в этой точке, генерируемым фиктивной областью Ω с подлежащими определению эффективными свойствами. Применяя данную гипотезу к задаче определения эффективных диффузионных свойств, имеем в терминах тензоров вклада в диффузию

$$\frac{V_\Omega}{V} \mathbf{H}_{eff}^D = \frac{1}{V} \sum_i V_i \mathbf{H}_i^D, \tag{1.3.20}$$

где $\mathbf{H}_{eff}^D$ – тензор вклада фиктивной области. Выражение для тензора вклада фиктивной области может быть получено в явном виде только для эллипсоидальной формы области Ω . В таком случае тензор вклада может быть определен через тензор Хилла фиктивной области $\mathbf{P}_\Omega$ формулой (1.2.23), в которой обозначим параметр сегрегации, определяющий постоянный скачок на границе раздела матрица/фиктивная область как s_Ω . Тогда равенство (1.3.20)

примет вид

$$\frac{V_\Omega}{V} \left[\left(\frac{\mathbf{D}^{eff}}{s_\Omega} - \mathbf{D}_0 \right)^{-1} + \mathbf{P}_\Omega \right] = \frac{1}{V} \sum_i V_i \mathbf{H}_i^D,$$

откуда следует выражение для эффективного тензора диффузии

$$\mathbf{D}^{eff} = s_\Omega \left\{ \mathbf{D}_0 + \left[\left[\frac{1}{V_\Omega} \sum_i V_i \mathbf{H}_i^D \right]^{-1} - \mathbf{P}_\Omega \right]^{-1} \right\}. \quad (1.3.21)$$

При построении схемы Максвелла в терминах тензоров вклада в сопротивляемость, согласно основной гипотезе метода имеем [96]

$$\frac{V_\Omega}{V} \mathbf{H}_{eff}^{DR} = \frac{1}{V} \sum_i V_i \mathbf{H}_i^{DR}, \quad (1.3.22)$$

где $\mathbf{H}_{eff}^{DR}$ – тензор вклада фиктивной области. Для эллипсоидальной фиктивной области тензор вклада определяется через тензор Хилла $\mathbf{Q}_\Omega$ формулой (1.2.24). Тогда равенство (1.3.22) примет вид

$$\frac{V_\Omega}{V} \left[\left(\left(\frac{\mathbf{D}^{eff}}{s_\Omega} \right)^{-1} - \mathbf{D}_0^{-1} \right)^{-1} + \mathbf{Q}_\Omega \right]^{-1} = \frac{1}{V} \sum_i V_i \mathbf{H}_i^{DR},$$

откуда следует выражение для эффективного тензора диффузии

$$\mathbf{D}^{eff} = s_\Omega \left\{ \mathbf{D}_0^{-1} + \left[\left[\frac{1}{V_\Omega} \sum_i V_i \mathbf{H}_i^{DR} \right]^{-1} - \mathbf{Q}_\Omega \right]^{-1} \right\}^{-1}. \quad (1.3.23)$$

В отсутствие $\mathbf{P}_\Omega$, $\mathbf{Q}_\Omega$ эффективный тензор диффузии совпадает с определяемым в рамках NIA. Таким образом, взаимодействие между изолированными неоднородностями учитывается в схеме Максвелла посредством введения в рассмотрение фиктивной области Ω . Форма области должна корректно учитывать формы изолированных неоднородностей, их ориентацию и свойства.

Вопрос выбора эллипсоидальной формы фиктивной области Ω детально обсуждается в статье [148]. В частности, отмечается, что при изотропном распределении одинаковых по форме неоднородностей форма области должна быть сферической, а при параллельном распределении – совпадать с формой изолированной неоднородности. В общем случае форма фиктивной области выбирается исходя из гипотезы, основанной на том, что соотношение длин полуосей эллипсоида можно считать приближенно равным отношению компонент одного из тензоров Хилла. На Рис. 1.3 представлены зависимости $\gamma_\Omega(\gamma)$ для сфероидальной неоднородности, введенные двумя способами в соответствии с представленным в [148] рекомендациями ($\mathbf{e}_3$ – орт оси симметрии). Будем далее полагать при рассмотрении трансверсально-изотропного материала, что фиктивная область является сфероидом с соотношением длин полуосей

$$\gamma_\Omega = \frac{\frac{1}{V} \sum_i V_i P_{11}}{\frac{1}{V} \sum_i V_i P_{33}}. \quad (1.3.24)$$

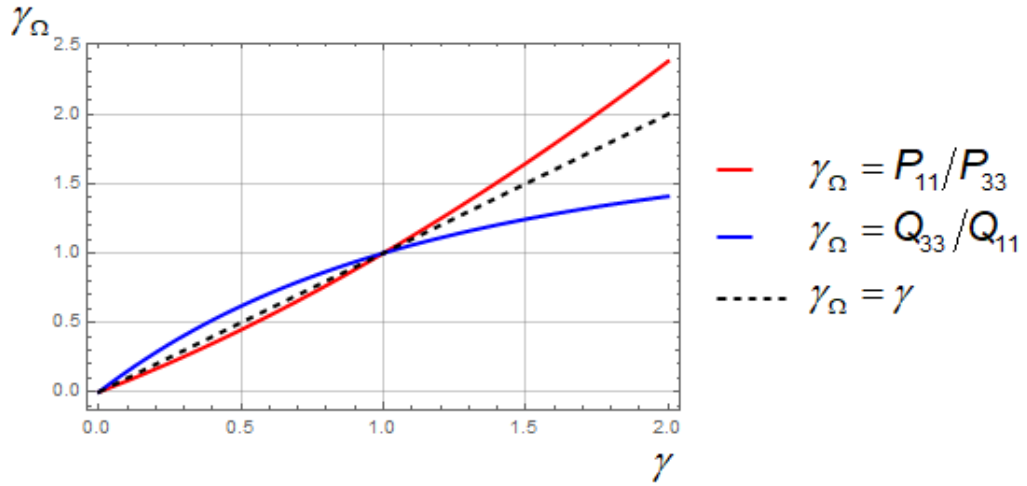


Рис. 1.3. Зависимости γ_Ω от компонент тензоров Хилла в случае единичной неоднородности

Обратим внимание на то, что выражения (1.3.21), (1.3.23) для эффективного тензора диффузии могут быть получены альтернативно при рассмотрении эквивалентной фиктивной области с эффективным коэффициентом

диффузии $\mathbf{D}_\Omega^{eff} = \mathbf{D}^{eff}/s_\Omega$. При этом, согласно полученным выражениям, эффективные свойства материала существенно зависят от параметра s_Ω , который определяет скачок на фиктивной границе и принципиально не может быть измерен. В частности, полагая $s_\Omega = 0$, материал перестает быть насыщенным, что вызывает сомнения по поводу резонности рассмотрения неидеального контакта на фиктивной границе. Далее ограничимся рассмотрением $s_\Omega = 1$.

Схему Максвелла можно отнести к методам эффективного поля. В работе [87] соответствующее схеме Максвелла эффективное поле было найдено в контексте задачи упругости. Следуя [87], определим эффективное поле в контексте задачи диффузии. Если на границе репрезентативного объема задана концентрация, то

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{J} \rangle_V &= -\mathbf{D}^{eff} \cdot \mathbf{G}^0 = - \left[\mathbf{D}_0 + \left(\left(\frac{1}{V_\Omega} \sum_i V_i \mathbf{H}_i^D \right)^{-1} - \mathbf{P}_\Omega \right)^{-1} \right] \cdot \mathbf{G}^0 = \\ &= - \left[\mathbf{D}_0 + \left[\left(\mathbf{I} - \mathbf{P}_\Omega \cdot \frac{1}{V_\Omega} \sum_i V_i \mathbf{H}_i^D \right) \cdot \left(\frac{1}{V_\Omega} \sum_i V_i \mathbf{H}_i^D \right)^{-1} \right]^{-1} \right] \cdot \mathbf{G}^0 = \\ &= - \left[\mathbf{D}_0 + \left(\frac{1}{V_\Omega} \sum_i V_i \mathbf{H}_i^D \right) \cdot \left(\mathbf{I} - \mathbf{P}_\Omega \cdot \frac{1}{V_\Omega} \sum_i V_i \mathbf{H}_i^D \right)^{-1} \right] \cdot \mathbf{G}^0,\end{aligned}$$

где в роли эффективного поля выступает

$$\mathbf{G}^{eff} = \left[\mathbf{I} - \mathbf{P}_\Omega \cdot \frac{1}{V_\Omega} \sum_i V_i \mathbf{H}_i^D \right]^{-1} \cdot \mathbf{G}^0. \quad (1.3.25)$$

Аналогично, задавая на границе репрезентативного объема поток, полу-

ЧИМ

$$\begin{aligned}
\langle \nabla c \rangle_V &= -(\mathbf{D}^{eff})^{-1} \cdot \mathbf{J}^0 = - \left[\mathbf{D}_0^{-1} + \left(\left(\frac{1}{V_\Omega} \sum_i V_i \mathbf{H}_i^{DR} \right)^{-1} - \mathbf{Q}_\Omega \right)^{-1} \right] \cdot \mathbf{J}^0 = \\
&= - \left[\mathbf{D}_0^{-1} + \left[\left(\mathbf{I} - \mathbf{Q}_\Omega \cdot \frac{1}{V_\Omega} \sum_i V_i \mathbf{H}_i^{DR} \right) \cdot \left(\frac{1}{V_\Omega} \sum_i V_i \mathbf{H}_i^{DR} \right)^{-1} \right]^{-1} \right] \cdot \mathbf{J}^0 = \\
&= - \left[\mathbf{D}_0^{-1} + \left(\frac{1}{V_\Omega} \sum_i V_i \mathbf{H}_i^{DR} \right) \cdot \left(\mathbf{I} - \mathbf{Q}_\Omega \cdot \frac{1}{V_\Omega} \sum_i V_i \mathbf{H}_i^{DR} \right)^{-1} \right] \cdot \mathbf{J}^0,
\end{aligned}$$

откуда следует, что эффективное поле в схеме Максвелла имеет вид

$$\mathbf{J}^{eff} = \left[\mathbf{I} - \mathbf{Q}_\Omega \cdot \frac{1}{V_\Omega} \sum_i V_i \mathbf{H}_i^{DR} \right]^{-1} \cdot \mathbf{J}^0. \quad (1.3.26)$$

Рассмотрим теперь метод эффективного поля Канауна-Левина [89, 107]. Суть метода заключается в том, что каждая неоднородность помещается в эффективное поле, зависящее от пространственного распределения центров неоднородностей. В рассмотрение вводятся характеристические функции областей, занятых неоднородностями (значение функций в точке равно единице или нулю в зависимости от того, принадлежит точка рассматриваемой области или нет). Каждая неоднородность окружается определенной “запретной зоной”, характеризующей симметрию текстуры, которая не пересекается с соседними. Обратимся к случаю, когда “запретная зона” имеет форму эллипсоида.

Предположим сначала, что на границе репрезентативного объема задана концентрация. По аналогии с задачей проводимости, рассмотренной в [87], определим эффективное поле, действующее на каждую неоднородность, в

терминах тензоров вклада как

$$\mathbf{G}^{eff} = \left[\mathbf{I} - \mathbf{P}_\Lambda \cdot \frac{1}{V} \sum_i V_i \mathbf{H}_i^D \right]^{-1} \cdot \mathbf{G}^0, \quad (1.3.27)$$

где $\mathbf{P}_\Lambda$ – тензор Хилла эллипсоидальной “запретной зоны”.

Вывод выражения для эффективного тензора диффузии полностью аналогичен выводу, представленному для схемы Мори-Танака. При этом вместо формулы (1.3.9) для эффективного поля используется формула (1.3.27). Итак, с учетом (1.3.10) получаем

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{J} \rangle_V &= - \left[\mathbf{D}_0 \cdot \mathbf{G}^0 + \frac{1}{V} \sum_i V_i (\mathbf{D}_i - s\mathbf{D}_0) \cdot (\mathbf{\Lambda}_c)_i \cdot \mathbf{G}^{eff} \right] = \\ &= - \left[\mathbf{D}_0 + \left(\frac{1}{V} \sum_i V_i (\mathbf{D}_i - s\mathbf{D}_0) \cdot (\mathbf{\Lambda}_c)_i \right) \cdot \right. \\ &\quad \left. \left(\mathbf{I} - \mathbf{P}_\Lambda \cdot \frac{1}{V} \sum_i V_i \mathbf{H}_i^D \right)^{-1} \right] \cdot \mathbf{G}^0, \end{aligned} \quad (1.3.28)$$

откуда следует формула для определения эффективного тензора диффузии:

$$\begin{aligned} \mathbf{D}^{eff} &= \mathbf{D}_0 + \frac{1}{V} \sum_i V_i \mathbf{H}_i^D \cdot \left(\mathbf{I} - \mathbf{P}_\Lambda \cdot \frac{1}{V} \sum_i V_i \mathbf{H}_i^D \right)^{-1} = \\ &= \mathbf{D}_0 + \left[\left(\frac{1}{V} \sum_i V_i \mathbf{H}_i^D \right)^{-1} - \mathbf{P}_\Lambda \right]^{-1}. \end{aligned} \quad (1.3.29)$$

Предположим теперь, что на границе репрезентативного объема задан поток. Тогда эффективное поле будет определяться как

$$\mathbf{J}^{eff} = \left[\mathbf{I} - \mathbf{Q}_\Lambda \cdot \frac{1}{V} \sum_i V_i \mathbf{H}_i^{DR} \right]^{-1} \cdot \mathbf{J}^0, \quad (1.3.30)$$

где $\mathbf{Q}_\Lambda$ – тензор Хилла эллипсоидальной “запретной зоны”.

Представив средний по репрезентативному объему градиент концентрации в виде

$$\begin{aligned}\langle \nabla c \rangle_V &= - \left[\mathbf{D}_0^{-1} \cdot \mathbf{J}^0 + \frac{1}{V} \sum_i V_i (s\mathbf{D}_i^{-1} - \mathbf{D}_0^{-1}) \cdot (\mathbf{\Lambda}_j)_i \cdot \mathbf{J}^{eff} \right] = \\ &= - \left[\mathbf{D}_0^{-1} + \left(\frac{1}{V} \sum_i V_i (s\mathbf{D}_i^{-1} - \mathbf{D}_0^{-1}) \cdot (\mathbf{\Lambda}_j)_i \right) \cdot \right. \\ &\quad \left. \left(\mathbf{I} - \mathbf{Q}_\Lambda \cdot \frac{1}{V} \sum_i V_i \mathbf{H}_i^{DR} \right)^{-1} \right] \cdot \mathbf{J}^0,\end{aligned}\tag{1.3.31}$$

получим

$$\begin{aligned}\mathbf{D}^{eff} &= \left[\mathbf{D}_0^{-1} + \frac{1}{V} \sum_i V_i \mathbf{H}_i^{DR} \cdot \left(\mathbf{I} - \mathbf{Q}_\Lambda \cdot \frac{1}{V} \sum_i V_i \mathbf{H}_i^{DR} \right)^{-1} \right]^{-1} = \\ &= \left\{ \mathbf{D}_0^{-1} + \left[\left(\frac{1}{V} \sum_i V_i \mathbf{H}_i^{DR} \right)^{-1} - \mathbf{Q}_\Lambda \right]^{-1} \right\}^{-1}.\end{aligned}\tag{1.3.32}$$

В рамках диссертационной работы ограничимся рассмотрением следующих форм “запретной” зоны в схеме Канауна-Левина:

- 1) Форма совпадает с формой отдельной неоднородности;
- 2) Форма является сферической (что характерно для случая изотропного распределения центров неоднородностей);
- 3) Форма совпадает с формой “эффетивной неоднородности”. В этом случае форма области может определяться аналогично тому, как это делается в схеме Максвелла для фиктивной гомогенизированной области, и схемы совпадут.

Анализируя выведенные с помощью методов Мори-Танака, Максвелла и Канауна-Левина формулы (1.3.12), (1.3.19), (1.3.21), (1.3.23), (1.3.29), (1.3.32)

для определения эффективного тензора диффузии материала, содержащего неоднородности с неидеальными контактами, обратим внимание на то, что они могут быть получены альтернативно при рассмотрении материала с эквивалентными неоднородностями с идеальными контактами на границах раздела фаз, характеризующихся тензором диффузии $\mathbf{D}_1^* = \mathbf{D}_1/s$.

Можно показать, что схемы гомогенизации Мори-Танка, Максвелла и Канауна-Левина являются обратимыми, т.е. результат, полученный в терминах тензоров вклада в диффузию, совпадает с результатом, полученным в терминах тензоров вклада в сопротивляемость (иными словами, совпадают формулы (1.3.12) и (1.3.19), (1.3.21) и (1.3.23), (1.3.29) и (1.3.32)).

Представим окончательные формулы для вычисления эффективного тензора диффузии материала с одинаковыми по форме неоднородностями в рамках рассмотренных методов в терминах тензоров вклада. Суммарный вклад может быть определен через объемную долю неоднородностей $\phi = \sum_i V_i/V$ и осредненный по ориентациям неоднородностей тензор $\langle \mathbf{H}^D \rangle$ или $\langle \mathbf{H}^{DR} \rangle$.

Выражения (1.3.4), (1.3.5), полученные в рамках NIA, сведутся соответственно к

$$\mathbf{D}^{eff} = \mathbf{D}_0 + \phi \langle \mathbf{H}^D \rangle, \quad (1.3.33)$$

$$\mathbf{D}^{eff} = \{ \mathbf{D}_0^{-1} + \langle \phi \mathbf{H}^{DR} \rangle \}^{-1}. \quad (1.3.34)$$

Выражения (1.3.12), (1.3.19), полученные с помощью метода Мори-Танка, примут вид

$$\begin{aligned} \mathbf{D}^{eff} &= \mathbf{D}_0 + \phi \langle \mathbf{H}^D \rangle \cdot \left[\left(\frac{\mathbf{D}_1}{s} - \mathbf{D}_0 \right)^{-1} \cdot \phi \langle \mathbf{H}^D \rangle + (1 - \phi) \mathbf{I} \right]^{-1} = \\ &= \left\{ \mathbf{D}_0^{-1} + \phi \langle \mathbf{H}^{DR} \rangle \cdot \left[\left(\left(\frac{\mathbf{D}_1}{s} \right)^{-1} - \mathbf{D}_0^{-1} \right)^{-1} \cdot \phi \langle \mathbf{H}^{DR} \rangle + (1 - \phi) \mathbf{I} \right]^{-1} \right\}^{-1}. \end{aligned} \quad (1.3.35)$$

Выражения (1.3.21), (1.3.23), полученные с помощью схемы Максвелла, будут определяться как

$$\begin{aligned}\mathbf{D}^{eff} &= \mathbf{D}_0 + \left[(\phi \langle \mathbf{H}^D \rangle)^{-1} - \mathbf{P}_\Omega \right]^{-1} = \\ &= \left\{ \mathbf{D}_0^{-1} + \left[(\phi \langle \mathbf{H}^{DR} \rangle)^{-1} - \mathbf{Q}_\Omega \right]^{-1} \right\}^{-1}.\end{aligned}\tag{1.3.36}$$

Выражения (1.3.29), (1.3.32), полученные с помощью метода Канауна-Левина, примут вид

$$\begin{aligned}\mathbf{D}^{eff} &= \mathbf{D}_0 + \left[(\phi \langle \mathbf{H}^D \rangle)^{-1} - \mathbf{P}_\Lambda \right]^{-1} = \\ &= \left\{ \mathbf{D}_0^{-1} + \left[(\phi \langle \mathbf{H}^{DR} \rangle)^{-1} - \mathbf{Q}_\Lambda \right]^{-1} \right\}^{-1}.\end{aligned}\tag{1.3.37}$$

Перечислим ситуации, когда схемы Мори-Танка, Максвелла и Канауна-Левина совпадают.

- Результаты, полученные с помощью метода Канауна-Левина, совпадают с результатами, полученными с помощью метода Максвелла, когда эллипсоидальная форма “запретной зоны” в схеме Канауна-Левина совпадает с формой фиктивной области в схеме Максвелла.
- Результаты, полученные с помощью метода Канауна-Левина, совпадают с результатами, полученными с помощью метода Мори-Танак, в случае параллельно ориентированных неоднородностей, когда при этом форма “запретной зоны” в схеме Канауна-Левина совпадает с формой отдельной неоднородности.
- Результаты, полученные с помощью метода Максвелла, совпадают с результатами, полученными с помощью метода Мори-Танак в случае параллельно ориентированных неоднородностей (при этом форма фиктивной области в схеме Максвелла всегда совпадает с формой отдельной

неоднородности).

Таким образом, схемы совпадают при тех же условиях, что и в контексте задачи проводимости [87].

Обратим внимание на то, что только схема Мори-Танака дает физически непротиворечивый результат при любом значении объемной доли неоднородностей. В частности, при $\phi = 1$ эффективный тензор диффузии совпадает с тензором диффузии эквивалентной неоднородности ($\mathbf{D}^{eff} = \mathbf{D}_1^*$), что означает, что свойства гетерогенного материала ожидаемо совпадают со свойствами неоднородности. Когда $\mathbf{D}_1^* = \mathbf{D}_1/s$, эффективный тензор диффузии зависит от параметра сегрегации. Методы гомогенизации Максвелла и Канауна-Левина дают соответствующие результаты при $\phi = 1$ только в случае параллельно ориентированных неоднородностей, при этом в схеме Канауна-Левина форма “запретной зоны” должна совпадать с формой неоднородности.

Кроме того, в общем случае распределения неоднородностей по ориентациям существует математическое ограничение на использование схем гомогенизации Максвелла и Канауна-Левина. Выражения в квадратных скобках в первых равенствах в уравнениях (1.3.36) и (1.3.37) не должны быть равны нулю (в противном случае возникнет сингулярность). Во избежание “искусственного” эффекта из-за наличия сингулярности, не имеющей физического смысла, в [153] была предложена линеаризация схемы Максвелла по взаимодействию между неоднородностями в контексте задачи упругости. Следуя [153], перепишем уравнение (1.3.21) в виде

$$\mathbf{D}^{eff} = \mathbf{D}_0 + \frac{1}{V_\Omega} \sum_i V_i \mathbf{H}_i^D \cdot \left(\mathbf{I} - \mathbf{P}_\Omega \cdot \frac{1}{V_\Omega} \sum_i V_i \mathbf{H}_i^D \right)^{-1}. \quad (1.3.38)$$

Выражение (1.3.38) может быть линеаризовано следующим образом:

$$\mathbf{D}^{eff} \approx \mathbf{D}_0 + \frac{1}{V_\Omega} \sum_i V_i \mathbf{H}_i^D + \frac{1}{V_\Omega} \sum_i V_i \mathbf{H}_i^D \cdot \mathbf{P}_\Omega \cdot \frac{1}{V_\Omega} \sum_i V_i \mathbf{H}_i^D. \quad (1.3.39)$$

При линеаризации использовалось представление эффективного тензора диффузии в терминах тензоров вклада $\mathbf{H}_i^D$ во избежание сингулярности, возникающей при использовании представления в терминах $\mathbf{H}_i^{DR}$.

Для материала с одинаковыми по форме неоднородностями справедливо следующее выражение для эффективного тензора диффузии, полученное в рамках линеаризованной схемы Максвелла:

$$\mathbf{D}^{eff} \approx \mathbf{D}_0 + \phi \langle \mathbf{H}^D \rangle + \phi^2 \langle \mathbf{H}^D \rangle \cdot \mathbf{P}_\Omega \cdot \langle \mathbf{H}^D \rangle. \quad (1.3.40)$$

1.3.2. Эффективный тензор диффузии трансверсально-изотропного материала

Рассмотрим трансверсально-изотропный материал со сфероидальными порами, имеющими преимущественную ориентацию. Ограничимся рассмотрением схем в терминах тензоров вклада в диффузию. Осредненный по ориентациям тензор вклада имеет следующий общий вид:

$$\langle \mathbf{H}^D \rangle = D_0 [a_H \boldsymbol{\theta} + b_H \mathbf{m}\mathbf{m}] \quad (1.3.41)$$

где $\boldsymbol{\theta} = \mathbf{I} - \mathbf{m}\mathbf{m}$, $\mathbf{m}$ – орт оси симметрии материала.

С учетом выражения для тензора вклада сфероидальной неоднородности (1.2.32), его осреднение по ориентациям сводится к осреднению диады $\mathbf{nn}$. В результате, с учетом формулы (1.1.2) получим

$$a_H = B_1 (1 - g_1) + B_2 g_1, \quad b_H = B_1 (1 - g_2) + B_2 g_2, \quad (1.3.42)$$

где функции $g_1 = g_1(\lambda)$, $g_2 = g_2(\lambda)$ определяются как

$$g_1 = g_1(\lambda) = \frac{18 - e^{-\frac{\lambda\pi}{2}}\lambda(3 + \lambda^2)}{6(9 + \lambda^2)},$$

$$g_2 = g_2(\lambda) = \frac{\left(3 + e^{-\frac{\lambda\pi}{2}}\lambda\right)(3 + \lambda^2)}{3(9 + \lambda^2)}.$$

В предельном случае при произвольном распределении неоднородностей по ориентациям (при $\lambda = 0$)

$$a_H = b_H = \frac{2B_1}{3} + \frac{B_2}{3} = \eta(s, \gamma, \alpha), \quad (1.3.43)$$

а при параллельном распределении (при $\lambda \rightarrow \infty$)

$$a_H = B_1(s, \gamma, \alpha), \quad b_H = B_2(s, \gamma, \alpha), \quad (1.3.44)$$

где $B_1(s, \gamma, \alpha)$, $B_2(s, \gamma, \alpha)$ определяются формулами (1.2.33).

Схему Мори-Танака, представленную формулой (1.3.35), можно перепи-

сать в следующем виде:

$$\begin{aligned}
\mathbf{D}^{eff} &= D_0 \mathbf{I} + \phi D_0 (a_H \boldsymbol{\theta} + b_H \mathbf{mm}) \cdot \\
&\left[(1 - \phi) \mathbf{I} + \phi \frac{s D_0}{D_1 - s D_0} \cdot (a_H \boldsymbol{\theta} + b_H \mathbf{mm}) \right]^{-1} = \\
&= D_0 \mathbf{I} + \phi D_0 (a_H \boldsymbol{\theta} + b_H \mathbf{mm}) \cdot \\
&\left[\frac{D_1 - s D_0}{\phi a_H s D_0 + (1 - \phi) (D_1 - s D_0)} \boldsymbol{\theta} + \frac{D_1 - s D_0}{\phi b_H s D_0 + (1 - \phi) (D_1 - s D_0)} \mathbf{mm} \right] = \\
&= D_0 \left(1 + \frac{\phi a_H (D_1 - s D_0)}{\phi a_H s D_0 + (1 - \phi) (D_1 - s D_0)} \right) \boldsymbol{\theta} + \\
&+ D_0 \left(1 + \frac{\phi b_H (D_1 - s D_0)}{\phi b_H s D_0 + (1 - \phi) (D_1 - s D_0)} \right) \mathbf{mm} = \\
&= D_0 \left(1 + \frac{\phi a_H (1 - s \alpha)}{\phi a_H s \alpha + (1 - \phi) (1 - s \alpha)} \right) \boldsymbol{\theta} + \\
&+ D_0 \left(1 + \frac{\phi b_H (1 - s \alpha)}{\phi b_H s \alpha + (1 - \phi) (1 - s \alpha)} \right) \mathbf{mm}.
\end{aligned} \tag{1.3.45}$$

Схема Максвелла, представленная формулой (1.3.36), примет вид

$$\begin{aligned}
\mathbf{D}^{eff} &= D_0 \mathbf{I} + \left[\frac{1}{\phi} \frac{1}{D_0} \left(\frac{1}{a_H} \boldsymbol{\theta} + \frac{1}{b_H} \mathbf{mm} \right) - \mathbf{P}_\Omega \right]^{-1} = \\
&= D_0 \left(1 + \frac{\phi a_H}{1 - \phi a_H P_{\Omega_{11}} D_0} \right) \boldsymbol{\theta} + D_0 \left(1 + \frac{\phi b_H}{1 - \phi b_H P_{\Omega_{33}} D_0} \right) \mathbf{mm}.
\end{aligned} \tag{1.3.46}$$

Схему Канауна-Левина, представленную формулой (1.3.37), можно переписать как

$$\begin{aligned}
\mathbf{D}^{eff} &= D_0 \mathbf{I} + \left[\frac{1}{\phi} \frac{1}{D_0} \left(\frac{1}{a_H} \boldsymbol{\theta} + \frac{1}{b_H} \mathbf{mm} \right) - \mathbf{P}_\Lambda \right]^{-1} = \\
&= D_0 \left(1 + \frac{\phi a_H}{1 - \phi a_H P_{\Lambda_{11}} D_0} \right) \boldsymbol{\theta} + D_0 \left(1 + \frac{\phi b_H}{1 - \phi b_H P_{\Lambda_{33}} D_0} \right) \mathbf{mm}.
\end{aligned} \tag{1.3.47}$$

Математическое ограничение на значение объемной доли неоднородностей, вызванное наличием сингулярности в схемах Максвелла и Канауна-Левина, определяется из неравенства нулю знаменателей в (1.3.46), (1.3.47),

откуда следует

$$\begin{cases} \phi < \frac{1}{a_H(s, \gamma, \alpha) D_0 P_{11}(D_0, \tilde{\gamma})} \\ \phi < \frac{1}{b_H(s, \gamma, \alpha) D_0 P_{33}(D_0, \tilde{\gamma})}, \end{cases} \quad (1.3.48)$$

где $\tilde{\gamma} = \gamma_\Omega$ в случае схемы Максвелла и $\tilde{\gamma} = \gamma_\Delta$ в случае схемы Канауна-Левина.

С учетом выражения для тензора Хилла сфероид (1.2.31), где заменим $\tilde{\theta}$ на θ , $\mathbf{n}$ на $\mathbf{m}$, γ на $\tilde{\gamma}$, получим окончательно

$$\begin{cases} \phi < \frac{1}{a_H(s, \gamma, \alpha) f_0(\tilde{\gamma})} \\ \phi < \frac{1}{b_H(s, \gamma, \alpha) (1 - 2f_0(\tilde{\gamma}))}. \end{cases} \quad (1.3.49)$$

Согласно ограничениям (1.3.49), “математическое” предельное значение объемной доли параллельно ориентированных неоднородностей больше или равно единицы:

$$\begin{cases} \phi < \frac{\alpha s + (1 - \alpha s) f_0(\gamma)}{(1 - \alpha s) f_0(\gamma)} = 1 + \frac{\alpha s}{(1 - \alpha s) f_0(\gamma)} \\ \phi < \frac{1 - 2(1 - \alpha s) f_0(\gamma)}{(1 - \alpha s) (1 - 2f_0(\gamma))} = 1 + \frac{\alpha s}{(1 - \alpha s) (1 - 2f_0(\gamma))}. \end{cases} \quad (1.3.50)$$

Значение объемной доли неоднородностей $\phi = 1$ можно интерпретировать как “физическое” предельное значение. Таким образом, при параллельно ориентированных неоднородностях проблемы сингулярности не возникает. Отметим, что здесь предполагалось, что форма запретной зоны в схеме Канауна-Левина совпадает с формой отдельной неоднородности.

В случаях, когда неоднородности ориентированы не параллельно, предельное значение, определяемое условиями (1.3.49), может быть меньше единицы. В частности, при произвольном распределении неоднородностей по ориентациям

$$\phi < \frac{3}{\eta(s, \gamma, \alpha)}, \quad (1.3.51)$$

и предельные значения $\phi \geq 1$ возникают при $\eta \leq 3$ (η определяется формулой (1.3.43)), что справедливо для сферических неоднородностей. “Физическое” предельное значение $\phi = 1$ достигается при $\alpha s = 0$, т.е. при $D_0/D_1^* = 0$, что справедливо при $D_1^* \rightarrow \infty$.

Использование линеаризованной схемы Максвелла, в которой не возникает “нефизичной” сингулярности, приведет к следующему выражению для эффективного тензора диффузии:

$$\begin{aligned} \mathbf{D}^{eff} \approx D_0 (1 + \phi a_H + \phi^2 a_H^2 D_0 P_{\Omega_{11}}) \boldsymbol{\theta} + \\ + D_0 (1 + \phi b_H + \phi^2 b_H^2 D_0 P_{\Omega_{33}}) \mathbf{mm}. \end{aligned} \quad (1.3.52)$$

1.4. Границы эффективных диффузионных свойств

Представленные в [87] границы для эффективных проводящих свойств могут быть использованы при определении эффективных коэффициентов диффузии материала с неоднородностями с идеальными контактами. Поскольку неоднородность с неидеальным контактом может быть заменена эквивалентной неоднородностью с идеальным контактом, характеризующейся коэффициентом диффузии D_1^* , представим границы Винера, основанные на применении “правила смесей” как

$$\frac{D_0 D_1^*}{D_0 \phi + D_1^* (1 - \phi)} \leq D^{eff} \leq D_0 (1 - \phi) + D_1^* \phi, \quad (1.4.1)$$

здесь учтено, что $D_1^* > D_0$.

Границы Хашина-Штрикмана для изотропного на макроуровне материала с учетом $D_1^* > D_0$ имеют вид

$$D_0 + \frac{\phi}{\frac{1-\phi}{3D_0} + \frac{1}{D_1^* - D_0}} \leq D^{eff} \leq D_1^* + \frac{1 - \phi}{\frac{\phi}{3D_1^*} + \frac{1}{D_0 - D_1^*}}. \quad (1.4.2)$$

Учитывая, что $D_0/D_1 = \alpha$ и что эквивалентная неоднородность характеризуется коэффициентом диффузии $D_1^* = D_1/s$, получим следующие обобщения границ Винера:

$$\frac{1}{\alpha s \phi + (1 - \phi)} \leq \frac{D^{eff}}{D_0} \leq (1 - \phi) + \frac{1}{\alpha s} \phi, \quad (1.4.3)$$

и границ Хашина-Штрикмана:

$$1 + \frac{3\phi(1 - \alpha s)}{(1 - \phi)(1 - \alpha s) + 3\alpha s} \leq \frac{D^{eff}}{D_0} \leq \frac{1}{\alpha s} + \frac{1}{\alpha s} \frac{3(1 - \phi)(\alpha s - 1)}{\phi(\alpha s - 1) + 3}. \quad (1.4.4)$$

Эффективные коэффициенты диффузии гетерогенного материала должны удовлетворять построенным границам: границам Винера при произвольной геометрии микроструктуры и более узким границам Хашина-Штрикмана в случае геометрии, при которой материал является изотропным на макроуровне. Нарушение границ указывает на серьезный недостаток той или иной схемы гомогенизации и ограничивает область ее применимости.

1.5. Влияние микроструктуры на эффективные коэффициенты диффузии

Согласно имеющимся в литературе данным, отношение коэффициента объемной диффузии к коэффициенту зернограницной диффузии α_m варьируется в широком диапазоне от 0.001 до 0.2, а отношение эффективного коэффициента диффузии поликристалла к коэффициенту объемной диффузии α_m^{eff} увеличивается при уменьшении размера зерна [48, 96]. Следуя [96], положим $\alpha_m = 0.015$ и $\alpha_m^{eff} = 2.2\text{--}4.4$. Тогда с учетом предположения $D_1 = D_{GB}$ и формулы (1.1.1) получим, что отношение коэффициентов диффузии α принимает значения в диапазоне от 0.03 до 0.07. Для определенности примем $\alpha = 0.05$.

Проанализируем влияние характерного для процесса диффузии эффекта сегрегации на эффективные коэффициенты диффузии. Ограничимся для определенности рассмотрением следующих форм сфероидальных пор: сплюснутых сфероидов с $\gamma = 0.1$, вытянутых сфероидов с $\gamma = 10$ и сфер ($\gamma = 1$).

Рассмотрим изотропный на макроуровне материал и проверим, удовлетворяют ли результаты, полученные с помощью обобщенных в разделе 1.3 схем Максвелла, Мори-Танака (М-Т) и Канауна-Левина (К-Л) построенным в разделе 1.4 оценкам, обобщающим границы Хашина-Штрикмана (H-S).

На Рис. 1.4 показано, что в случае сферических неоднородностей результаты, полученные с помощью всех перечисленных схем, совпадают с нижней границей (при этом схема Канауна-Левина совпадает со схемой Максвелла, т.к. для изотропного материала выполняется $\gamma_\Lambda = \gamma_\Omega = 1$), как и в задачи проводимости. При этом, в отличие от задач проводимости, обе границы непостоянны и зависят от параметра сегрегации. Уменьшение параметра сегрегации приводит к увеличению границ. Верхняя граница чувствительна к значению s даже при малых объемных долях неоднородностей, тогда как нижняя граница существенно меняется только при больших значениях ϕ .

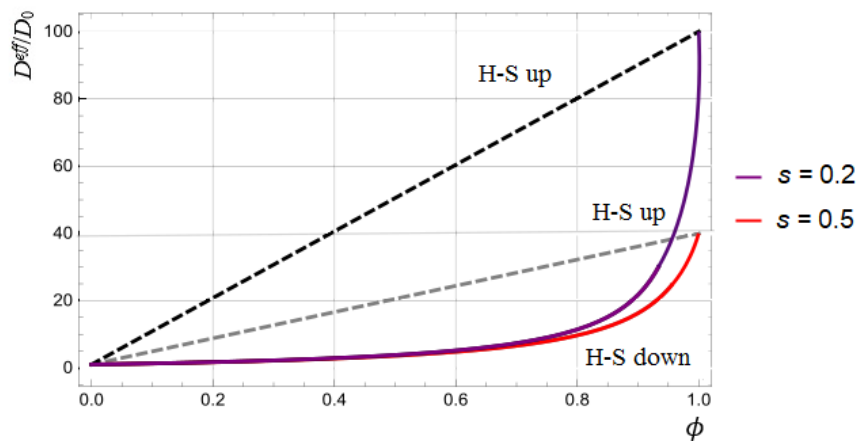


Рис. 1.4. Соответствие эффективного коэффициента диффузии материала со сферическими порами границам Хашина-Штрикмана

Согласно представленным на Рис. 1.5 зависимостям, в случае сплюснутых

и вытянутых сфероидальных пор только схема Мори-Танака дает эффективные свойства, находящиеся между верхней и нижней оценками, в то время как результаты, полученные с помощью схем Максвелла и Канауна-Левина, нарушают верхнюю границу из-за наличия “нефизичной” сингулярности. Линеаризованная схема Максвелла лишена такого недостатка, однако, она нарушает нижнюю границу при некотором значении объемной доли неоднородностей. В то же время, это значение больше значения, при котором “оригинальная” схема Максвелла нарушает верхнюю границу, а сама линеаризованная схема дает значения, более близкие к схеме Мори-Танака, что свидетельствует о предпочтительности ее использования при определении эффективного коэффициента диффузии материала с высокой пористостью (по сравнению с “оригинальной” схемой Максвелла). Результаты получены при $s = 0.5$.

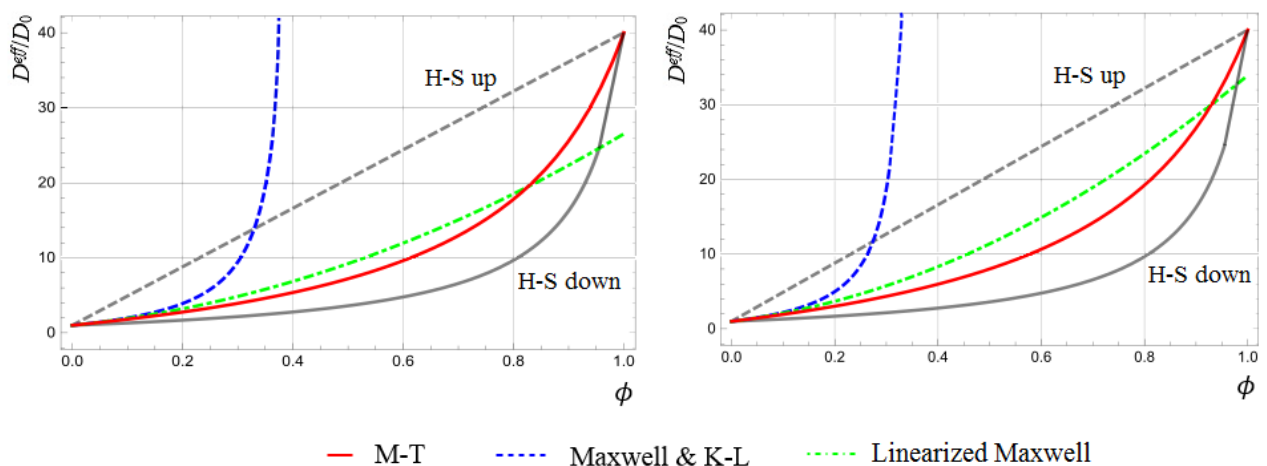


Рис. 1.5. Соответствие эффективного коэффициента диффузии материала со сплюснутыми (слева) и вытянутыми (справа) сфероидальными порами границам Хашина-Штрикмана; $s = 0.5$

Согласно формуле (1.3.51), математическое ограничение на объемную долю неоднородностей в схемах Максвелла и Канауна-Левина определяется значением коэффициента η , зависимость которого от параметра сегрегации для сплюснутых и вытянутых неоднородностей представлена на Рис. 1.6. Поскольку, согласно Рис. 1.6, при уменьшении параметра сегрегации значение

η увеличивается, увеличение скачка концентрации на границе раздела матрица/неоднородность приводит к нарушению схемами верхней границы при меньшем значении объемной доли неоднородностей.

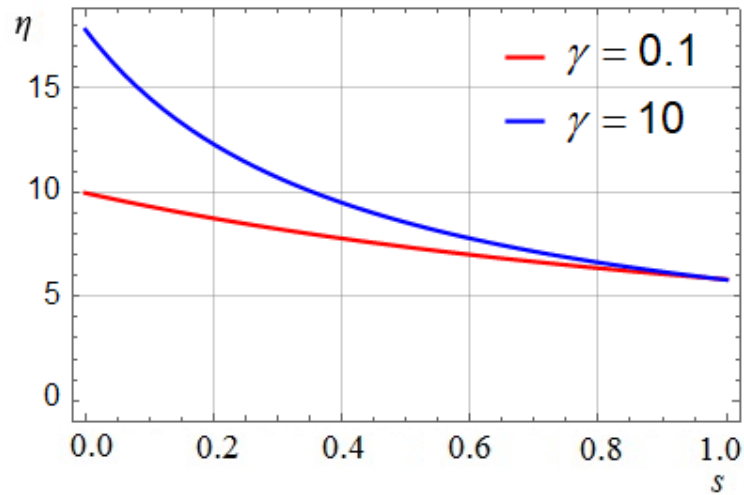


Рис. 1.6. Зависимость коэффициента η от параметра сегрегации

Зависимости эффективных коэффициентов диффузии материала с произвольно ориентированными сфероидальными порами от параметра сегрегации s , полученные при использовании методов Мори-Танака, Канауна-Левина и схемы Максвелла, показаны на Рис. 1.7. Во избежание проблемы сингулярности, результаты получены при $\phi = 0.1$. Увеличение скачка концентрации (т.е. уменьшение параметра сегрегации) увеличивает эффективный коэффициент диффузии. Это означает, что в условиях непрерывного потока при наличии сегрегации материал насыщается в большей степени (заметим, что рассмотренный эффект сегрегации не учитывает эффекта “запирания”, при котором диффундирующее вещество оседает в ловушках, в роли которых могут выступать поры). Уменьшение параметра сегрегации увеличивает также и разницу между результатами, полученными в рамках различных схем. Видно, что сегрегация оказывает большее влияние на результаты, полученные с помощью схем гомогенизации Максвелла и Канауна-Левина.

Согласно представленным на Рис. 1.4 и 1.7 результатам, в отличие от ма-

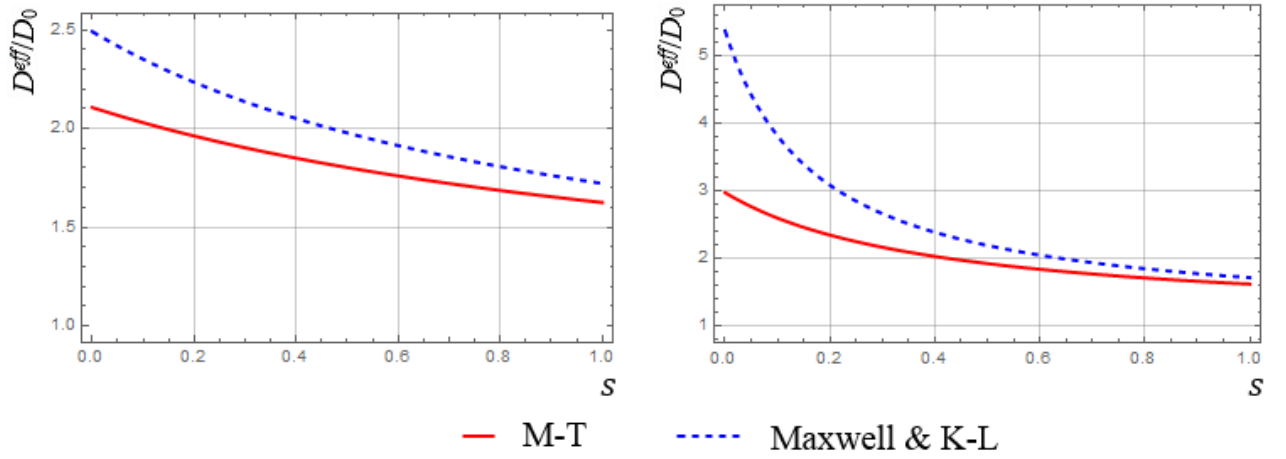


Рис. 1.7. Зависимости эффективного коэффициента диффузии от параметра сегрегации для материала с произвольно ориентированными сплюснутыми (слева) и вытянутыми (справа) сфероидальными порами

териала со сфероидальными порами, оседание диффундирующего вещества внутри сферических пор не приводит к значительному увеличению эффективного коэффициента диффузии при малых объемных долях неоднородностей. С этой точки зрения сегрегация внутри пор увеличивает “влияние формы” неоднородностей.

Сравнение зависимостей коэффициента диффузии от параметра сегрегации для материала с порами, имеющими преимущественную ориентацию ($\lambda = 3$), показано на Рис. 1.8. Поскольку при $\gamma = 0.1$ эффективный коэффициент диффузии в направлении оси симметрии материала мало отличается от коэффициента диффузии матрицы и, аналогично, при $\gamma = 10$ эффективный коэффициент диффузии в плоскости изотропии материала мало отличается от D_0 , данные зависимости не изображены на графиках. В обобщенной схеме Канауна-Левина учитывались три формы запретной зоны, перечисленные в разделе 1.3: (1) $\gamma_\Lambda = \gamma$, (2) $\gamma_\Lambda = 1$, (3) $\gamma_\Lambda = \gamma_\Omega$.

Согласно представленным на Рис. 1.8 результатам, как и в случае изотропного на макроуровне материала, уменьшение параметра сегрегации увеличивает эффективные коэффициенты диффузии и разницу между метода-

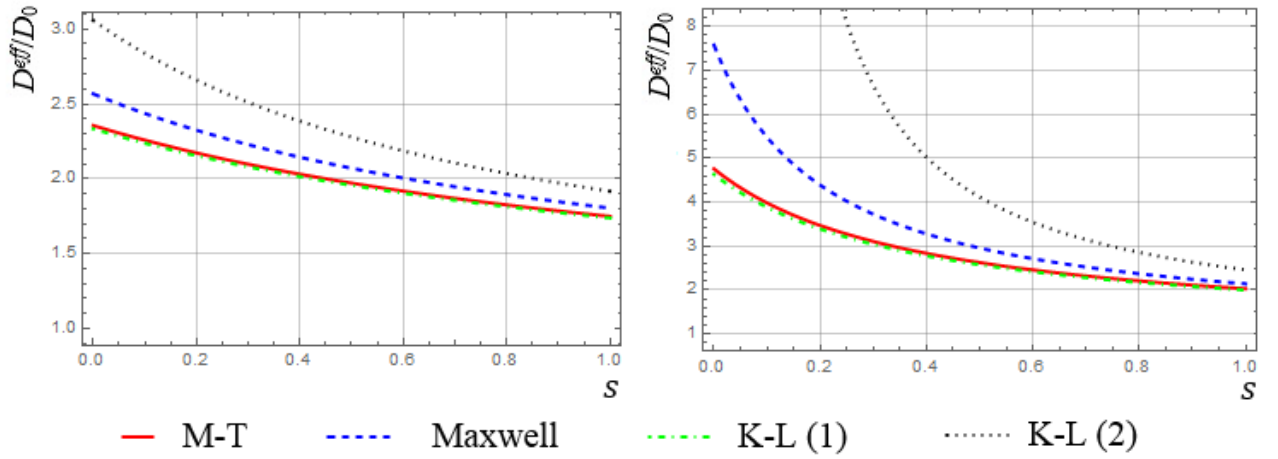


Рис. 1.8. Зависимости эффективного коэффициента диффузии от параметра сегрегации для материала со сплюснутыми ($D_{11}^{eff} = D_{22}^{eff}$, слева) и вытянутыми (D_{33}^{eff} , справа) сфероидальными порами, имеющими преимущественную ориентацию ($\lambda = 3$)

ми. Видно, что сегрегация оказывает большее влияние на результаты, полученные в рамках схемы гомогенизации Максвелла. Схема Канауна-Левина близка к схеме Мори-Танака в случае, когда форма запретной зоны совпадает с формой отдельной неоднородности. Отметим, что введение сферической формы запретной зоны в схеме Канауна-Левина для материала с вытянутыми сфероидальными порами приводит к некорректным результатам при малых значениях параметра сегрегации. Это связано с тем, что значение объемной доли неоднородностей $\phi = 0.1$ близко к “математическому пределу”, связанному с “нефизичной” сингулярностью.

Поскольку объемная доля неоднородностей не может принимать все значения от 0 до 1 при использовании методов гомогенизации Канауна-Левина и Максвелла из-за “математического предела”, зависимости эффективного коэффициента диффузии от объемной доли сфероидальных неоднородностей исследовались на примере схемы Мори-Танака. На Рис. 1.9 представлены зависимости, построенные при разных значениях параметра разброса; $s = 0.5$.

Из Рис. 1.9 (слева) видно, что ориентация сплюснутых сфероидов не оказывает существенного влияния на эффективные диффузионные свойства ма-

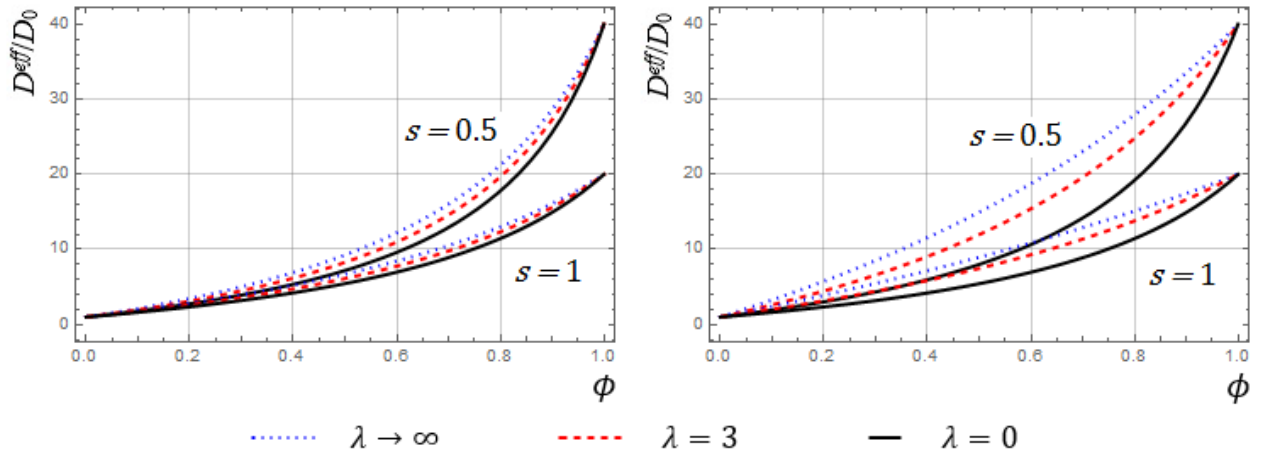


Рис. 1.9. Зависимости эффективного коэффициента диффузии от параметра сегрегации для материала со сплюснутыми ($D_{11}^{eff} = D_{22}^{eff}$, слева) и вытянутыми (D_{33}^{eff} , справа) сфероидальными порами, имеющими преимущественную ориентацию ($\lambda = 3$)

материала в плоскости изотропии. Таким образом, наличие преимущественного направления определяет направление наиболее быстрой диффузии в материале, тогда как эффективные свойства, характеризующие массоперенос в этом направлении, можно рассчитать по формулам, полученным для изотропного материала. В случае вытянутых сфероидальных пор (Рис. 1.9, справа) разброс неоднородностей по ориентациям играет более существенную роль. При этом, вообще говоря, в обоих случаях наличие сегрегации усиливает влияние ориентации неоднородностей на эффективные свойства, что видно при сравнении “разброса” графиков, построенных при $s = 0.5$ с “разбросом” графиков, построенных при $s = 1$.

Проанализируем отдельно влияние формы на эффективные диффузионные свойства материала. Положим для определенности $s = 0.5$, $\phi = 0.1$ и ограничимся рассмотрением схемы Максвелла. Зависимость эффективного коэффициента диффузии от отношения длин полуосей сфероида показан на Рис. 1.10–1.11 соответственно для произвольного распределения неоднородностей по ориентациям и практически параллельного распределения ($\lambda = 20$). При произвольном распределении неоднородностей влияние сфери-

ческих пор оказывает минимальный эффект. При наличии преимущественного направления форма неоднородностей ожидаемо усиливает анизотропию свойств материала.

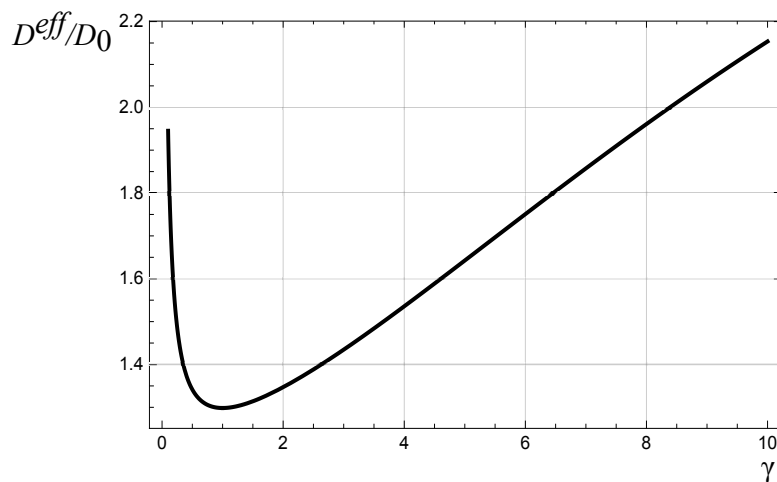


Рис. 1.10. Зависимости эффективного коэффициента диффузии от формы произвольно ориентированных пор

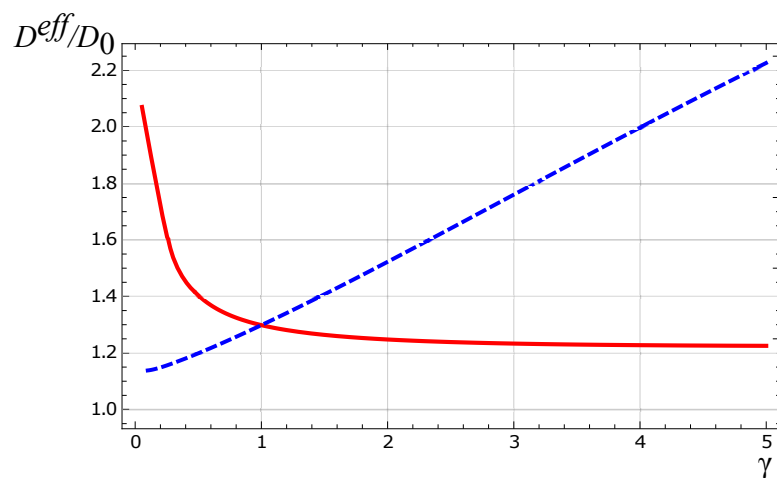


Рис. 1.11. Зависимости эффективных коэффициентов диффузии от формы пор, имеющих преимущественную ориентацию: $D_{11}^{eff} = D_{22}^{eff}$ (сплошная линия) и D_{33}^{eff} (пунктирная линия)

1.6. Верификация результатов

Верификация осуществляется на основании проверок выполнимости предельных переходов в полученных соотношениях, качественного соответствия

полученных результатов физическим представлениям и количественного соответствия экспериментальным данным.

Поскольку выведенные в предыдущих разделах соотношения для эффективных коэффициентов диффузии материала, содержащего неоднородности с неидеальным контактом на границе раздела фаз, являются обобщением частного случая материала с неоднородностями с идеальным контактом, необходимо, чтобы при значении параметра сегрегации $s = 1$ полученные в работе результаты сводились к известным из литературы выражениям, полученным в контексте проводимости. Действительно, прямая проверка показывает, что все полученные в предыдущих разделах результаты сходятся к результатам, полученным на основании прямой аналогии между задачами диффузии и тепло- и электропроводности. Отметим, что задачи проводимости, в свою очередь, были верифицированы во многих работах.

Согласно полученным результатам, увеличение скачка концентрации на границе раздела фаз (уменьшение параметра s) приводит к увеличению коэффициента диффузии. Действительно, исходя из определения коэффициента диффузии как количественной характеристики скорости диффузии, равной количеству вещества, проходящего в единицу времени через участок единичной площади при единичном градиенте концентрации [121], оседание диффундирующего вещества внутри пор неизбежно приводит к увеличению количественной характеристики процесса диффузии.

Перейдем к сравнению результатов с экспериментальными данными. Для проведения однозначного сравнения необходима, вообще говоря, информация о микроструктуре материала, параметре сегрегации, а также об эффективном коэффициенте диффузии и коэффициенте диффузии матрицы. К сожалению, в литературе практически отсутствуют работы, в которых и описана микроструктура материала с микротрещинами, и определены коэффициенты диффузии материала с дефектами и без них, не говоря уже об оценках

значения параметра сегрегации. Одной из немногих является работа [156], в которой авторы проанализировали проницаемость цинк-никелевого покрытия для водорода в зависимости от его микроструктурных характеристик. В частности, авторы отметили, что для таких покрытий типично наличие межзеренных трещин и сквозных пор. Микроструктура покрытий с дефектами и без дефектов проанализирована на основании изображений, полученных с помощью сканирующего электронного микроскопа. Найдено отношение $D^{eff}/D_0 = 14.3$. На основании приведенных в [156] изображений можно сказать, что объемная доля неоднородностей составляет порядка 20% ($\phi \approx 0.2$), а микротрещины можно моделировать вытянутыми сфероидальными порами ($\gamma \approx 50$), имеющими преимущественную ориентацию ($\lambda \approx 3$).

Варьируя неизвестный из [156] параметр сегрегации, можно оценить эффективные коэффициенты диффузии в плоскости изотропии и в направлении оси симметрии трансверсально-изотропного на макроуровне материала. Результаты, полученные с помощью метода Мори-Танака, представлены в Таблице 1.1. Методы Канауна-Левина и Максвелла не использовались, поскольку в данном случае объемная доля неоднородностей достаточно велика, и в методах может возникать “нефизичная” сингулярность при малых значениях s .

Таблица 1.1. Теоретические значения эффективного коэффициента диффузии цинк-никелевого покрытия при разных значениях параметра сегрегации

Параметр сегрегации s	Приведенный эффективный коэффициент диффузии D^{eff}/D_0
1	2.1–3.8
0.5	2.8–6.5
0.1	7.5–24.1

Из представленных в Таблице 1.1 результатов видно, что при учете сегрегации определяемый теорией диапазон значений эффективных коэффициентов диффузии ближе к экспериментальным данным. При $s = 0.1$ экспери-

ментальное значение попадает в предсказываемый теорией диапазон.

1.7. Эффективные упругие свойства

Наличие пор в материале влияет не только на его диффузионные свойства, но и на упругие, что важно принимать во внимание при моделировании диффузии с учетом влияния напряжений. На сегодняшний день упругие модули определены для широкого класса материалов со сложной микроструктурой. Ограничимся рассмотрением частного случая материала с несплошностями, возникающими при насыщении водородом. В этом случае в материале могут возникать межзеренные трещины, которые будем моделировать одинаковыми по форме сплюснутыми сфероидами, и отдельные пустоты, которые будем моделировать сферами.

Рассмотрим следующие варианты распределения сфероидальных неоднородностей по ориентациям:

- 1) Произвольная ориентация;
- 2) Преимущественная ориентация, задаваемая функцией плотности распределения по ориентациям (1.1.2);
- 3) Произвольная ориентация осей вращения эллипсоидов в одной плоскости.

Все три типа микроструктуры могут наблюдаться в реальных материалах. Конкретная ориентация микротрещин зависит от многих факторов, в частности, от формы и ориентации зерен металла, типа обработки металлических изделий, вида их нагружения. Перечисленные типы микроструктуры соответствуют трансверсально-изотропному материалу на макроуровне.

Результаты раздела 1.7 опубликованы в работе [26].

1.7.1. Эффективные упругие модули материала с характерной для водородной деградации микроструктурой

При определении эффективных упругих свойств вклад неоднородности в податливость может быть описан через тензор 4-го ранга $\mathbf{H}$, характеризующий дополнительную деформацию, возникающую в репрезентативном объеме ввиду присутствия изолированной неоднородности при задании на границе силы, определяемой через однородное поле напряжений $\mathbf{T}^0$ [86, 87]:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \left(\mathbf{S}_0 + \frac{V_1}{V} \mathbf{H} \right) : \mathbf{T}^0, \quad (1.7.1)$$

где $\mathbf{S}_0$ – тензор податливости матрицы.

Отметим, что альтернативно можно ввести в рассмотрение дополнительные напряжения, инициированные неоднородностью при заданных граничных условиях в перемещениях [86, 87]. Такой подход позволяет определить тензор вклада в жесткость. Разница между двумя подходами проявляется только при использовании NIA. В рамках диссертационной работы мы ограничимся рассмотрением тензоров вклада в податливость.

Тензор вклада эллипсоидальной неоднородности в податливость может быть выражен через второй тензор Хилла $\mathbf{Q}^E$ [87]:

$$\mathbf{H} = \left[(\mathbf{S}_1 - \mathbf{S}_0)^{-1} + \mathbf{Q}^E \right]^{-1}, \quad (1.7.2)$$

где $\mathbf{S}_1$ – тензор податливости неоднородности.

Второй тензор Хилла связан с первым тензором Хилла $\mathbf{P}^E$ соотношением

$$\mathbf{Q}^E = \mathbf{C}_0 - \mathbf{C}_0 : \mathbf{P}^E : \mathbf{C}_0, \quad (1.7.3)$$

где $\mathbf{C}_0$ – тензор жесткости матрицы, а тензор четвертого ранга $\mathbf{P}^E$ выражается через производные функции Грина для перемещений $\mathbf{G}^E$ как [87]

$$\mathbf{P}^E = \left(\nabla \int_{V_1} \mathbf{G}^E(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \nabla dV' \right)_{(1,2)(3,4)}^S. \quad (1.7.4)$$

Здесь $(\cdot)_{(1,2)(3,4)}^S$ означает симметрию по перестановке индексов в первой и второй паре векторов.

Тензор Хилла в явном виде может быть получен для эллипсоидальной неоднородности. В случае сфероидальной неоднородности в изотропной матрице тензоры Хилла и определяемые через них тензоры вклада являются трансверсально-изотропными (ось симметрии сонаправлена с осью симметрии неоднородности) и могут быть представлены как линейные комбинации элементов тензорного базиса $\mathbf{T}_1$ – $\mathbf{T}_6$ [11]:

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_1 &= \tilde{\boldsymbol{\theta}}\tilde{\boldsymbol{\theta}}, & \mathbf{T}_2 &= \frac{1}{2} \left(\left(\tilde{\boldsymbol{\theta}}\tilde{\boldsymbol{\theta}} \right)_{(1,4)}^T + \left(\tilde{\boldsymbol{\theta}}\tilde{\boldsymbol{\theta}} \right)_{(2,4)}^T - \tilde{\boldsymbol{\theta}}\tilde{\boldsymbol{\theta}} \right), \\ \mathbf{T}_3 &= \tilde{\boldsymbol{\theta}}\mathbf{nn}, & \mathbf{T}_4 &= \mathbf{nn}\tilde{\boldsymbol{\theta}}, \\ \mathbf{T}_5 &= \frac{1}{4} \left(\mathbf{n}\tilde{\boldsymbol{\theta}}\mathbf{n} + \left(\mathbf{n}\tilde{\boldsymbol{\theta}}\mathbf{n} \right)_{(1,2)(3,4)}^T + \left(\tilde{\boldsymbol{\theta}}\mathbf{nn} \right)_{(1,4)}^T + \left(\tilde{\boldsymbol{\theta}}\mathbf{nn} \right)_{(2,3)}^T \right), & \mathbf{T}_6 &= \mathbf{nnnn}. \end{aligned} \quad (1.7.5)$$

Поры и микротрещины характеризуются нулевыми упругими модулями. Тогда $\mathbf{S}_1 \rightarrow \infty$, а выражение (1.7.2) сводится к $\mathbf{H} = (\mathbf{Q}^E)^{-1}$. Введенный формулами (1.7.5) тензорный базис позволяет представить трансверсально-изотропный тензор $\mathbf{Q} = \sum_{i=1}^6 q_i \mathbf{T}_i$ и обратный к нему в одном базисе:

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}^{-1} &= \frac{q_6}{4(q_1 a q_6 - q_3 q_4)} \mathbf{T}_1 + \frac{1}{q_2} \mathbf{T}_2 - \frac{q_3}{2(q_1 q_6 - q_3 q_4)} \mathbf{T}_3 - \\ &\quad - \frac{q_4}{2(q_1 q_6 - q_3 q_4)} \mathbf{T}_4 + \frac{4}{q_5} \mathbf{T}_5 + \frac{q_1}{(q_1 q_6 - q_3 q_4)} \mathbf{T}_6. \end{aligned} \quad (1.7.6)$$

Компоненты второго тензора Хилла для сфероидальной неоднородности

определяются следующим образом [150]:

$$\begin{aligned} q_1 &= \mu_0 [4\tilde{\kappa} - 1 - 2(3\tilde{\kappa} - 1)f_0 - 2\tilde{\kappa}f_1], q_2 = 2\mu_0 [1 - (2 - \tilde{\kappa})f_0 - \tilde{\kappa}f_1], \\ q_3 &= q_4 = 2\mu_0 [(2\tilde{\kappa} - 1)f_0 + 2\tilde{\kappa}f_1], q_5 = 4\mu_0 [f_0 + 4\tilde{\kappa}f_1], \\ q_6 &= 8\mu_0\tilde{\kappa}[f_0 - f_1], \tilde{\kappa} = (1 - \nu_0)/2, \end{aligned} \quad (1.7.7)$$

где μ_0 , ν_0 – модуль сдвига и коэффициент Пуассона матрицы, соответственно; $f_0 = f_0(\gamma)$ определяется формулой (1.2.28), а $f_1 = f_1(\gamma)$ вводится как

$$f_1 = f_1(\gamma) = \frac{1}{4(1 - \gamma^{-2})^2} [(2 + \gamma^{-2})g - 3\gamma^{-2}], \quad (1.7.8)$$

где $g = g(\gamma)$ определяется формулой (1.2.29).

Для сферической неоднородности $\gamma = 1$, $g = 1$, $f_0 = 1/3$, $f_1 = 1/15$. Тензор вклада является изотропным и может представлен в следующем виде:

$$\mathbf{H}_p = \frac{15(1 - \nu_0)}{2\mu_0} \left[\frac{1}{10(1 + \nu_0)} \frac{1}{3} \mathbf{II} + \frac{1}{7 - 5\nu_0} \left(\mathbf{E} - \frac{1}{3} \mathbf{II} \right) \right], \quad (1.7.9)$$

где $\mathbf{E} = \left((\mathbf{II})_{(1,4)}^T + (\mathbf{II})_{(2,4)}^T \right) / 2$ – единичный тензор четвертого ранга.

Изотропные тензоры $\mathbf{II}$ и $\mathbf{E}$ могут быть представлены в базисе $\mathbf{T}_1, \dots, \mathbf{T}_6$ следующим образом [87]:

$$\mathbf{II} = \mathbf{T}_1 + \mathbf{T}_3 + \mathbf{T}_4 + \mathbf{T}_6, \quad \mathbf{E} = \frac{1}{2} \mathbf{T}_1 + \mathbf{T}_2 + 2\mathbf{T}_5 + \mathbf{T}_6. \quad (1.7.10)$$

Эффективный тензор податливости определяется в рамках NIA следующим образом [87]:

$$\mathbf{S}^{eff} = \mathbf{S}_0 + \frac{1}{V} \sum_i V_i \mathbf{H}_i, \quad (1.7.11)$$

а в рамках схемы Максвелла – формулой [149]

$$\mathbf{S}^{eff} = \mathbf{S}_0 + \left\{ \left[\frac{1}{V_\Omega} \sum_i V_i \mathbf{H}_i \right]^{-1} - \mathbf{Q}_\Omega^E \right\}^{-1}, \quad (1.7.12)$$

где $\mathbf{Q}_\Omega^E$ – второй тензор Хилла, определенный для фиктивной гомогенизированной области Ω .

Определим суммарный вклад изолированных неоднородностей в податливость. Осредненное значение тензора вклада сферических неоднородностей совпадает с тензором вклада отдельной сферической поры (1.7.9) в силу симметрии. В случае присутствия в материале одновременно и сфероидальных микротрещин, и сферических пор, суммарный вклад неоднородностей будет определяться как

$$\frac{1}{V_\Omega} \sum_i V_i \mathbf{H}_i = \phi_{mc} \langle \mathbf{H}_{mc} \rangle + \phi_p \mathbf{H}_p, \quad (1.7.13)$$

где индексы mc , p относятся соответственно к сфероидальным микротрещинам и сферическим порам.

Для осреднения тензора вклада сфероидальных неоднородностей достаточно осреднить элементы тензорного базиса, т.е.

$$\langle \mathbf{H}_{mc} \rangle = \sum_{i=1}^6 h_{mc(i)} \langle \mathbf{T}_i \rangle. \quad (1.7.14)$$

При преимущественном распределении сфероидов по ориентациям для осреднения элементов тензорного базиса их необходимо проинтегрировать по поверхности полусферы единичного радиуса:

$$\langle \mathbf{T}_i \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{\Omega_{1/2}} \mathbf{T}_i d\Omega_{1/2}. \quad (1.7.15)$$

В случае произвольной ориентации осей симметрии сфероидов в некото-

рой плоскости, для осреднения элементов тензорного базиса их необходимо проинтегрировать по единичной окружности l_1 , лежащей в этой плоскости:

$$\langle \mathbf{T}_i \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{l_1} \mathbf{T}_i dl_1. \quad (1.7.16)$$

Форма фиктивной области является сфероидальной с соотношением длин полуосей, выраженным как [148]

$$\gamma_\Omega = \begin{cases} \sum_i V_i Q_{3333}^{E(i)} / \sum_i V_i Q_{1111}^{E(i)}, \sum_i V_i Q_{3333}^{E(i)} / \sum_i V_i Q_{1111}^{E(i)} \leq 1, \\ \sum_i V_i P_{1111}^{E(i)} / \sum_i V_i P_{3333}^{E(i)}, \sum_i V_i Q_{3333}^{E(i)} / \sum_i V_i Q_{1111}^{E(i)} > 1, \end{cases} \quad (1.7.17)$$

Тогда для определения формы фиктивной области необходимо найти

$$\frac{1}{V_\Omega} \sum_i V_i \mathbf{Q}_i^E = \phi_{mc}^E \langle \mathbf{Q}_{mc} \rangle + \phi_p^E \mathbf{Q}_p. \quad (1.7.18)$$

Осреднение тензоров $(\mathbf{Q}_{mc})_i$ сводится к осреднению элементов тензорного базиса.

Эффективные модули Юнга трансверсально-изотропного материала определяются из тензора податливости следующим образом:

$$E_{11}^{eff} = E_{22}^{eff} = \frac{1}{S_{1111}^{eff}}, E_{33}^{eff} = \frac{1}{S_{3333}^{eff}}, \quad (1.7.19)$$

здесь учтено, что ось симметрии материала совпадает с направлением $\mathbf{e}_3$.

При произвольном распределении неоднородностей по ориентациям материал будет изотропным, и тензор податливости удобно представить как

$$\mathbf{S}^{eff} = K^{eff} \mathbf{\Pi} + \mu^{eff} \left(\mathbf{E} - \frac{1}{3} \mathbf{\Pi} \right), \quad (1.7.20)$$

где K^{eff} , μ^{eff} – эффективный модуль объемного сжатия и эффективный мо-

дугль сдвига соответственно.

Из (1.7.20) удобно выражать эффективные модули K^{eff} и μ^{eff} . В частном случае сферических неоднородностей эти модули определяются как

$$\frac{K^{eff}}{K_0} = \frac{1 - 3K_0\alpha_K\phi A}{1 + 3K_0(1 - \alpha_K)\phi A}, \quad (1.7.21)$$

$$\frac{\mu^{eff}}{\mu_0} = \frac{1 - 2\mu_0\alpha_G\phi B}{1 + 2\mu_0(1 - \alpha_G)\phi B}, \quad (1.7.22)$$

где K_0 – модуль объемного сжатия матрицы;

$$\begin{aligned} \alpha_K &= \frac{2(1 - 2\nu_0)}{(1 - \nu_0)}, \quad \alpha_G = \frac{(7 - 5\nu_0)}{15(1 - \nu_0)}, \\ A &= \frac{20h_{mc1} + 10(h_{mc3} + h_{mc4}) + 5h_{mc6}}{15}, \\ B &= \frac{2h_{mc1} + 6h_{mc2} - 2(h_{mc3} + h_{mc4}) + 3h_{mc5} + 2h_{mc6}}{15}. \end{aligned}$$

Модуль Юнга будут выражаться через K^{eff} и μ^{eff} следующим образом:

$$E^{eff} = \frac{9K^{eff}\mu^{eff}}{3K^{eff} + \mu^{eff}}. \quad (1.7.23)$$

1.7.2. Влияние микроструктуры на эффективные модули Юнга

Эффективные упругие свойства определены для стали с модулем сдвига $\mu_0 = 80$ ГПа и коэффициентом Пуассона $\nu_0 = 0.3$ (модуль Юнга стали $E_0 = 2\mu_0(1 + \nu_0)$).

Учитывается, что в стали могут одновременно присутствовать два типа неоднородностей: микротрещины, моделируемые сплюснутыми сфероидами с $\gamma = 0.1$, и сферические поры ($\gamma = 1$). Значения суммарной пористости положим в пределах от 0 до 10%. При этом исследуем материал со следующими типами микроструктуры: присутствуют только сплюснутые

сфероидальные поры ($\phi_{mc} = \phi, \phi_p = 0$); суммарный объем сплюснутых сфероидальных пор относится к суммарному объему сферических пор как 2:1 ($\phi_{mc} = 2\phi/3, \phi_p = \phi/3$); суммарный объем сплюснутых сфероидальных пор равен суммарному объему сферических пор ($\phi_{mc} = \phi_p = \phi/2$); присутствуют только сферические поры ($\phi_{mc} = 0, \phi_p = \phi$).

Зависимости эффективных модулей Юнга от объемной доли неоднородностей представлены на Рис. 1.12.

Как и следовало ожидать, увеличение объемной доли неоднородностей приводит к уменьшению упругих модулей. При этом в зависимости от распределения сфероидальных пор по ориентациям, они оказывают больший или меньший вклад по сравнению со сферическими порами. В частности, при произвольном распределении неоднородностей (Рис. 1.12, а) сферические поры оказывают меньшее влияние на значение упругого модуля, чем сфероидальные поры при той же концентрации. При преимущественной ориентации неоднородностей модуль Юнга в направлении оси симметрии материала уменьшается в большей степени, чем модуль Юнга в плоскости изотропии (Рис. 1.12, б и в). Наоборот, при распределении осей симметрии неоднородностей в одной плоскости модуль Юнга в направлении оси симметрии материала уменьшается в меньшей степени (Рис. 1.12, г и д).

Зависимость эффективных модулей Юнга материала от параметра разброса λ была исследована на примере материала со сфероидальными порами с $\gamma = 0.1$. Результаты представлены на Рис. 1.13.

При значении параметра разброса $\lambda = 0$ материал ведет себя изотропно и характеризуется эффективным модулем Юнга $E^{eff}/E_0 = 0.95$. Из представленных на Рис. 1.13 зависимостей видно, что увеличение отклонения осей симметрии сфероидов от преимущественного направления (уменьшение параметра разброса) приводит к более резкому изменению эффективных упругих свойств материала. При этом характер изменения модулей Юнга в двух

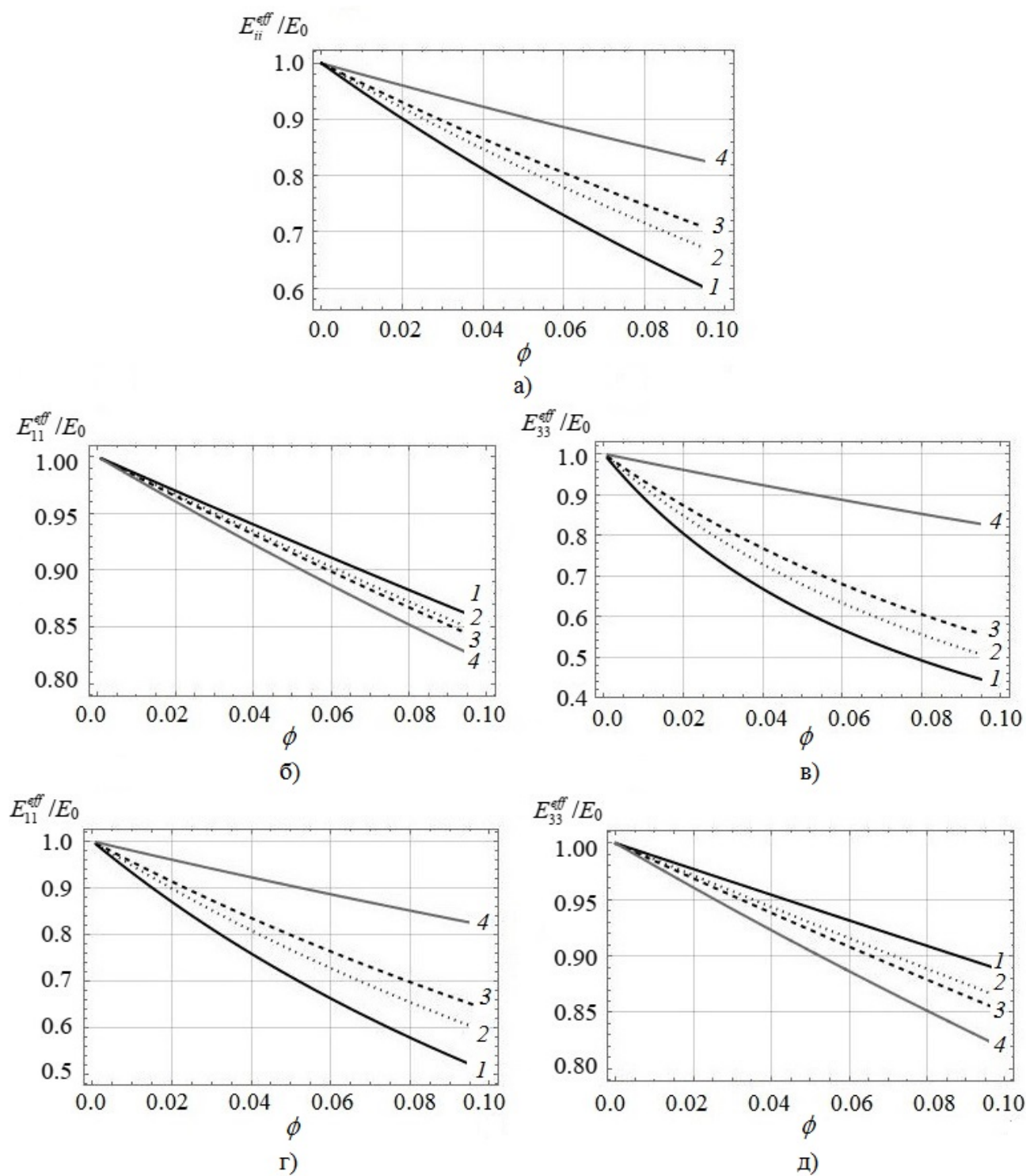


Рис. 1.12. Зависимости эффективных модулей Юнга от объемной доли неоднородностей материала при (1) ($\phi_{mc} = \phi, \phi_p = 0$); (2) ($\phi_{mc} = 2\phi/3, \phi_p = \phi/3$); (3) ($\phi_{mc} = \phi_p = \phi/2$); (4) ($\phi_{mc} = 0, \phi_p = \phi$). Рассматриваются различные варианты распределения сфероидов по ориентациям: а) 1, б) и в) 2 ($\lambda = 10$), г) и д) 3, см. пояснения в тексте

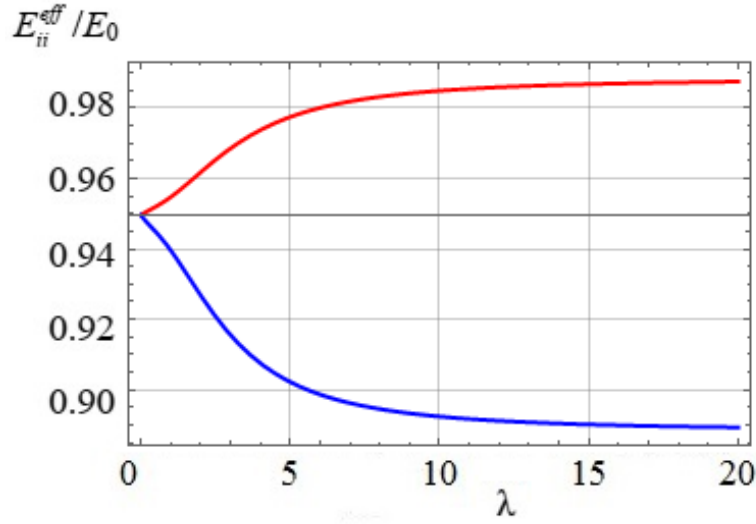


Рис. 1.13. Зависимости эффективных модулей Юнга $E_{11}^{eff}/E_0 = E_{22}^{eff}/E_0$ (красная линия) и E_{33}^{eff}/E_0 (синяя линия) от параметра разброса

направлениях различен, а именно: модуль Юнга в направлении оси симметрии материала уменьшается при выравнивании неоднородностей друг относительно друга ($\lambda \rightarrow \infty$), и наоборот, увеличение разброса неоднородностей по ориентациям ($\lambda \rightarrow 0$) приводит к уменьшению модуля Юнга в плоскости изотропии.

1.7.3. Верификация результатов

Для верификации определенных с помощью метода гомогенизации Максвелла эффективных упругих свойств сравним результаты с представленными в работе [141] численными данными. В [141] исследовался материал с произвольно ориентированными круговыми трещинами, который соответствует изотропному материалу на макроуровне. Тензор податливости такого материала удобно вводить в соответствии с выражением (1.7.20).

При исследовании влияния узких круговых трещин на эффективные свойства материала в качестве параметра микроструктуры корректнее выбирать не пористость материала, а плотность трещин $\rho = Na^3/V$ [87, 141]. При этом формально можно ввести следующее соотношение между двумя параметра-

ми микроструктуры: $\phi = 4\pi\gamma\rho/3$.

При построении трехмерной численной модели авторы [141] задавали и плотность трещин, и пористость материала, на основании чего можно заключить, что в модель вводились сфероидальные поры с $\gamma = 0.026$. В результате авторами [141] были получены значения эффективного модуля сдвига в зависимости от плотности трещин. Сравнение полученных нами результатов с результатами, представленными в работе [141] показано на Рис. 1.14. Видно, что полученные в диссертационной работе результаты хорошо согласуются с численными (погрешность аналитических результатов составила не более 4%).

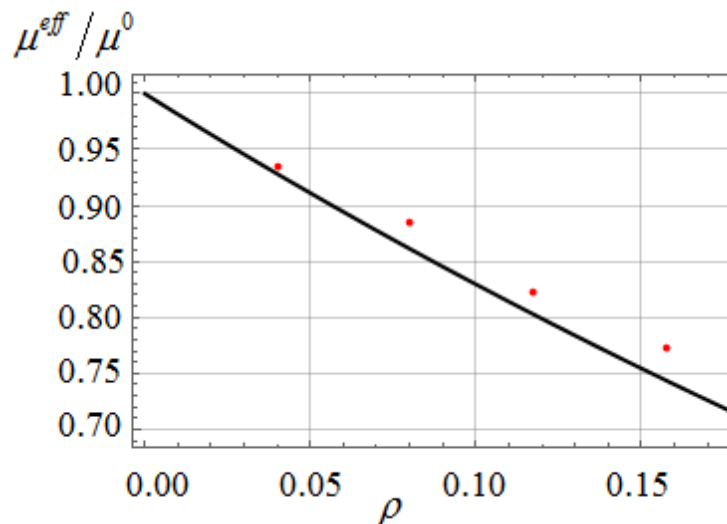


Рис. 1.14. Сравнение зависимости эффективного модуля сдвига от плотности трещин с численными результатами из [141] (точки)

1.8. Перекрестные соотношения между эффективными диффузионными и упругими свойствами

Установление перекрестных соотношений между эффективными свойствами материалов с определенной микроструктурой является одной из фундаментальных проблем механики. Данные соотношения определяют взаимо-

связь между изменениями физических свойств, различных по природе, но вызванных одними и теми же особенностями микроструктуры материала. Использование соотношений дает возможность определять одни эффективные свойства через другие.

Детальный обзор данной проблемы представлен в работе [87]. Согласно [87], опубликованные исследования можно условно разделить на четыре направления: качественные изыскания, установление эмпирических зависимостей, определение диапазонов изменения характеристик материалов и получение соотношений в явном виде.

Взаимосвязь эффективных упругих и проводящих свойств материалов в явном виде была установлена в работах [151, 152]. Полученные авторами выражения можно использовать для описания в общем случае анизотропных материалов с изотропной матрицей. При этом в [151, 152] показано, что точность соотношений зависит от формы неоднородностей и разницы в упругих свойствах компонент композита. В статье [117] получены связующие уравнения между прочностными характеристиками материала и теплопроводностью металлического композита с чешуйками графита. В статьях [118, 147] получены перекрестные соотношения между эффективным тепловым расширением и эффективной теплопроводностью. Показано, что точность полученных соотношений зависит от формы неоднородностей и разницы в теплопроводности фаз композита. В статьях [36, 37] получены зависимости между эффективным коэффициентом диффузии (без учета эффекта сегрегации) и теплопроводностью металл-алмазного композита. В статье [116] в явном виде получены соотношения между тепловыми и электропроводящими свойствами композита.

Основываясь на аналогии между уравнениями диффузии и теплопроводности, следуя изложенной в [151, 152] методике, получим в явном виде перекрестные соотношения между эффективными упругими и диффузионными

свойствами материала и оценим их применимость с учетом наличия эффекта сегрегации.

Результаты раздела 1.8 опубликованы в работе [27].

1.8.1. Общий вид перекрестных соотношений

Перекрестные соотношения между эффективными упругими и проводящими свойствами, полученные в работах [151, 152], основаны на том, что изменение этих различных по природе свойств контролируется одними и теми же микроструктурными параметрами. При выводе соотношений использовались два основных предположения: неоднородности имеют форму сфероидов; эффективные свойства определяются в рамках NIA.

При этом в [151, 152] показано, что полученные соотношения выполняются (в том числе) для материалов с неоднородностями, форма которых отлична от сфероидальной, и при больших концентрациях, чем допускает NIA. Это объясняется тем, что форма и концентрация неоднородностей влияют на упругие и проводящие свойства в одинаковой степени.

В рамках диссертационного исследования ограничимся рассмотрением материала с одинаковыми по форме неоднородностями. Обратимся к представлению эффективного тензора диффузии в рамках NIA и выразим эффективные свойства через

$$\boldsymbol{\omega} = \frac{1}{V} \sum_i V_i (\mathbf{nn})^{(i)}, \quad \phi = \text{tr} \boldsymbol{\omega} = \frac{1}{V} \sum_i V_i \quad (1.8.1)$$

следующим образом:

$$\frac{1}{D_0} \mathbf{D}^{eff} - \mathbf{I} = \mathbf{I} - D_0 (\mathbf{D}^{eff})^{-1} = B_1 \phi \mathbf{I} + (B_2 - B_1) \boldsymbol{\omega}. \quad (1.8.2)$$

Установление явной взаимосвязи между эффективными упругими и диффузионными свойствами возможно, если они выражаются через одни и те

же микроструктурные параметры, т. е. скалярный параметр ϕ и тензорный параметр $\boldsymbol{\omega}$. При определении эффективных упругих свойств материала с одинаковыми по форме неоднородностями, выражение (1.7.11), полученное в рамках NIA, можно переписать в виде

$$\mathbf{S}^{eff} = \mathbf{S}_0 + \phi (W_1 \mathbf{II} + W_2 \mathbf{E}) + W_3 (\mathbf{I}\boldsymbol{\omega} + \boldsymbol{\omega}\mathbf{I}) + W_4 (\mathbf{E} \cdot \boldsymbol{\omega} + \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{E}) + W_5 \boldsymbol{\Omega}, \quad (1.8.3)$$

где $\boldsymbol{\Omega} = \frac{1}{V} \sum_i V_i (\mathbf{nnnn})^{(i)}$, а коэффициенты W_1 – W_5 выражаются через компоненты тензора вклада как

$$\begin{aligned} W_1 &= h_1 - h_2/2, & W_2 &= h_2, & W_3 &= -2h_1 + h_2 + 2h_3, \\ W_4 &= -2h_2 + h_5, & W_5 &= h_1 + \frac{h_2}{2} - 2h_3 - h_5 + h_6. \end{aligned}$$

Таким образом, для получения соотношений между эффективными свойствами, в выражении для эффективного тензора податливости (1.8.3) необходимо избавиться от слагаемого, содержащего тензор 4-го ранга $\boldsymbol{\Omega}$. Это возможно за счет следующей корректировки коэффициентов W_1 – W_4 [151, 152]:

$$\mathbf{S}^{eff} = \mathbf{S}_0 + \frac{1}{E_0} \left[\phi (s_1 \mathbf{II} + s_2 \mathbf{E}) + \frac{s_3}{2} (\mathbf{I}\boldsymbol{\omega} + \boldsymbol{\omega}\mathbf{I}) + \frac{s_4}{2} (\mathbf{E} \cdot \boldsymbol{\omega} + \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{E}) \right], \quad (1.8.4)$$

где s_1 – s_4 определяются как

$$\begin{aligned} s_1 &= E_0 \left(\hat{h}_1 - \hat{h}_2/2 \right), & s_2 &= E_0 \hat{h}_2, \\ s_3 &= E_0 \left(-2\hat{h}_1 + \hat{h}_2 + 2\hat{h}_3 \right), & s_4 &= E_0 \left(-2\hat{h}_2 + \hat{h}_5 \right), \end{aligned}$$

а коэффициенты $\hat{h}_1$ – $\hat{h}_5$ выражаются непосредственно через компоненты h_1 – h_6

следующим образом:

$$\begin{aligned}\hat{h}_i &= h_i (1 - \delta \operatorname{sign} h_i) \quad i = 1, 2, 6, \\ \hat{h}_i &= h_i (1 + \delta \operatorname{sign} h_i) \quad i = 3, 5, \\ \delta &= \frac{h_1 + h_2/2 - 2h_3 - h_5 + h_6}{|h_1| + |h_2|/2 + 2|h_3| + |h_5| + |h_6|}.\end{aligned}$$

Для вывода соотношений между эффективными упругими и диффузионными свойствами материала для общего случая распределения неоднородностей по ориентациям, выразим тензор $\boldsymbol{\omega}$ и параметр ϕ через тензор $\mathbf{D}^{eff}$:

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\omega} &= \frac{1}{(B_2 - B_1)} \left(\frac{1}{D_0} \mathbf{D}^{eff} - \mathbf{I} \right) - \frac{B_1}{(B_2 - B_1)} \phi \mathbf{I}, \\ \phi &= \frac{\operatorname{tr} \mathbf{D}^{eff} - 3D_0}{D_0 (2B_1 + B_2)}\end{aligned}\tag{1.8.5}$$

и через тензор $(\mathbf{D}^{eff})^{-1}$:

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\omega} &= \frac{1}{(B_2 - B_1)} \left(\mathbf{I} - D_0 (\mathbf{D}^{eff})^{-1} \right) - \frac{B_1}{(B_2 - B_1)} \phi \mathbf{I}, \\ \phi &= \frac{3 - D_0 \operatorname{tr} (\mathbf{D}^{eff})^{-1}}{2B_1 + B_2}.\end{aligned}\tag{1.8.6}$$

В результате подстановки этих выражений в формулу (1.8.4) получим два соотношения, устанавливающих явную взаимосвязь между эффективной податливостью и эффективными диффузионными свойствами:

$$\begin{aligned}E_0 (\mathbf{S}^{eff} - \mathbf{S}_0) &= (\alpha_1 \mathbf{II} + \alpha_2 \mathbf{E}) (\operatorname{tr} \mathbf{D}^{eff} / D_0 - 3) + \\ &+ \alpha_3 [(\mathbf{D}^{eff} / D_0 - \mathbf{I}) \mathbf{I} + \mathbf{I} (\mathbf{D}^{eff} / D_0 - \mathbf{I})] + \\ &+ \alpha_4 [(\mathbf{D}^{eff} / D_0 - \mathbf{I}) \cdot \mathbf{E} + \mathbf{E} \cdot (\mathbf{D}^{eff} / D_0 - \mathbf{I})]\end{aligned}\tag{1.8.7}$$

при использовании соотношений (1.8.5) и

$$\begin{aligned}
E_0 (\mathbf{S}^{eff} - \mathbf{S}_0) = & (\alpha_1 \mathbf{I} \mathbf{I} + \alpha_2 \mathbf{E}) \left(3 - D_0 \text{tr}(\mathbf{D}^{eff})^{-1} \right) + \\
& + \alpha_3 \left[\left(\mathbf{I} - D_0 (\mathbf{D}^{eff})^{-1} \right) \mathbf{I} + \mathbf{I} \left(\mathbf{I} - D_0 (\mathbf{D}^{eff})^{-1} \right) \right] + \\
& + \alpha_4 \left[\left(\mathbf{I} - D_0 (\mathbf{D}^{eff})^{-1} \right) \cdot \mathbf{E} + \mathbf{E} \cdot \left(\mathbf{I} - D_0 (\mathbf{D}^{eff})^{-1} \right) \right]
\end{aligned} \tag{1.8.8}$$

при использовании соотношений (1.8.6); здесь

$$\begin{aligned}
\alpha_1 = \frac{s_1 (B_2 - B_1) - s_3 B_1}{(B_2 - B_1) (2B_1 + B_2)}, \quad \alpha_2 = \frac{s_2 (B_2 - B_1) - s_4 B_1}{(B_2 - B_1) (2B_1 + B_2)}, \\
\alpha_3 = \frac{s_3}{2 (B_2 - B_1)}, \quad \alpha_4 = \frac{s_4}{2 (B_2 - B_1)}.
\end{aligned}$$

1.8.2. Перекрестные соотношения между эффективными модулями Юнга и коэффициентами диффузии

Для определения взаимосвязи между эффективными упругими модулями и эффективными коэффициентами диффузии необходимо использовать компонентное представление выражений (1.8.7) и (1.8.8). В случае изотропного материала

$$\frac{E^{eff}}{E_0} = \left[1 + (3\alpha_1 + 3\alpha_2 + 2\alpha_3 + 2\alpha_4) \left(\frac{D^{eff}}{D_0} - 1 \right) \right]^{-1} \tag{1.8.9}$$

при использовании тензорного выражения (1.8.7) и

$$\frac{E^{eff}}{E_0} = \left[1 + (3\alpha_1 + 3\alpha_2 + 2\alpha_3 + 2\alpha_4) \left(1 - \frac{D_0}{D^{eff}} \right) \right]^{-1} \tag{1.8.10}$$

при использовании тензорного выражения (1.8.8).

Изотропному гетерогенному материалу соответствует два случая: неоднородности имеют сферическую форму; неоднородности распределены по ориентациям произвольным образом. Соотношения (1.8.9) и (1.8.10) являются

точными в первом случае, поскольку $\delta = 0$ и, следовательно, приближенное выражение для эффективного тензора податливости (1.8.4) совпадает с точным. Во втором случае $\delta \neq 0$ и выражения (1.8.9), (1.8.10) являются приближенными.

Проверим, что в первом случае формулы (1.8.9), (1.8.10) совпадают с результатом, получаемым напрямую. Ограничимся рассмотрением материала с порами. Подстановка компонент тензоров вклада даст

$$\frac{E^{eff}}{E_0} = \left[1 + \frac{(1 - \nu_0)(9 + 5\nu_0)}{2(7 - 5\nu_0)} \frac{1 + 2s\alpha}{1 - s\alpha} \left(\frac{D^{eff}}{D_0} - 1 \right) \right]^{-1}, \quad (1.8.11)$$

$$\frac{E^{eff}}{E_0} = \left[1 + \frac{(1 - \nu_0)(9 + 5\nu_0)}{2(7 - 5\nu_0)} \frac{1 + 2s\alpha}{1 - s\alpha} \left(1 - \frac{D_0}{D^{eff}} \right) \right]^{-1}. \quad (1.8.12)$$

Чтобы получить взаимосвязь между эффективными свойствами напрямую, выразим объемную долю неоднородностей непосредственно через эффективный коэффициент диффузии, определяемый в рамках NIA, и подставим в точное выражение для эффективного тензора податливости, определяемого также в рамках NIA.

В соответствии с (1.2.32) и с учетом $f_0 = 1/3$ тензоры вклада сферической поры в диффузию и в сопротивляемость определяются выражениями

$$\mathbf{H}_p^D = \frac{3(1 - \alpha s)}{2s\alpha + 1} D_0 \mathbf{I}, \quad \mathbf{H}_p^{DR} = -\frac{3(1 - \alpha s)}{(2s\alpha + 1) D_0} \mathbf{I}. \quad (1.8.13)$$

Тогда из (1.3.4) следует, что объемная доля неоднородностей выражается как

$$\phi = \frac{1 + 2\alpha s}{3(1 - \alpha s)} \frac{D^{eff} - D_0}{D_0}, \quad (1.8.14)$$

из (1.3.5) следует аналогичное представление

$$\phi = \frac{1 + 2\alpha s}{3(1 - \alpha s)} \frac{D^{eff} - D_0}{D^{eff}}. \quad (1.8.15)$$

Подстановка (1.8.14) в выражение для тензора податливости (1.7.11), определенного в рамках NIA, с учетом тензора вклада сферической поры в податливость (1.7.9) и формулы (1.7.19) для определения непосредственно модуля Юнга приведет к выражению, домножив которое на E_0 и возведя в минус первую степень, действительно получим представление (1.8.11).

Подстановка (1.8.15) в то же выражение для податливости (1.7.11) с учетом (1.7.9) и (1.7.19) позволит получить (1.8.12).

Таким образом, выполнена проверка взаимосвязывающих соотношений для случая микроструктуры, при которой они являются точными. Оценим теперь точность приближенных соотношений (1.8.9) и (1.8.10) для случая произвольного распределения неоднородностей по ориентациям. Для этого сравним эти приближенные выражения с точными, получаемыми напрямую. Для установления точных соотношений определим объемную долю неоднородностей через эффективный коэффициент диффузии изотропного материала и затем подставим полученное выражение в уравнение для определения эффективного модуля Юнга (эффективные свойства будем определять в рамках NIA). Адекватность такого подхода обусловлена изотропией эффективных тензоров, в результате которой единственным общим микроструктурным параметром, определяющим эффективные свойства материала, является скалярный параметр ϕ .

Средний тензор вклада в податливость может быть представлен как $\langle \mathbf{H} \rangle = \sum_{i=1}^6 h_i \langle \mathbf{T}_i \rangle = \sum_{i=1}^6 \langle h_i \rangle \mathbf{T}_i$. Тогда эффективный модуль Юнга находится как

$$\begin{aligned} \frac{1}{E^{eff}} &= \frac{1}{E_0} + \phi \left(\langle h_1 \rangle + \frac{\langle h_2 \rangle}{2} \right) = \\ &= \frac{1}{E_0} + \phi \frac{1}{15} (8h_1 + 4h_2 + 2h_3 + 2h_4 + 2h_5 + 3h_6). \end{aligned} \quad (1.8.16)$$

При изотропном распределении сфероидальных неоднородностей

$$\phi = \frac{D^{eff} - D_0}{\eta D_0}. \quad (1.8.17)$$

Подставляя выражение (1.8.17) в (1.8.16) и возводя в минус первую степень, получим следующую связь между эффективными свойствами:

$$\frac{E^{eff}}{E_0} = \left[1 + \frac{E_0(8h_1 + 4h_2 + 2h_3 + 2h_4 + 2h_5 + 3h_6)}{15\eta} \left(\frac{D^{eff}}{D_0} - 1 \right) \right]^{-1}. \quad (1.8.18)$$

Альтернативно, в рамках NIA в терминах тензоров вклада в сопротивляемость получаем следующее представление для объемной доли неоднородностей:

$$\phi = \frac{D^{eff} - D_0}{\eta D^{eff}}, \quad (1.8.19)$$

откуда следует

$$\frac{E^{eff}}{E_0} = \left[1 + \frac{E_0(8h_1 + 4h_2 + 2h_3 + 2h_4 + 2h_5 + 3h_6)}{15\eta} \left(1 - \frac{D_0}{D^{eff}} \right) \right]^{-1}. \quad (1.8.20)$$

Поскольку NIA в разных терминах дает разные результаты, возникает вопрос, какие соотношения предпочтительнее использовать (податливость-диффузия или податливость-сопротивляемость). Ответ на этот вопрос неоднозначен и зависит прежде всего от того, какие результаты лучше описывают экспериментальные данные. Как правило, экспериментальные данные лучше описываются не с помощью NIA, а с помощью методов, учитывающих взаимодействие между неоднородностями. Помимо этого, результат, полученный с помощью таких методов в терминах тензоров вклада в диффузию совпадает с результатом, полученным в терминах тензоров вклада в сопротивляемость и, таким образом, результат однозначен, в отличие от NIA. В качестве такого метода рассмотрим схему Максвелла и затем сравним полученные результаты.

При изотропном распределении неоднородностей эффективный коэффициент диффузии определяется из схемы Максвелла согласно формуле (1.3.46) с учетом (1.3.43):

$$D^{eff} = D_0 \frac{3 + 2\phi\eta}{3 - \phi\eta}, \quad (1.8.21)$$

откуда можно выразить объемную долю неоднородностей как

$$\phi = \frac{3}{\eta} \frac{D^{eff} - D_0}{D^{eff} + 2D_0}. \quad (1.8.22)$$

Подставив выражение (1.8.22) в формулу для определения эффективного модуля Юнга по схеме Максвелла для изотропного материала, получим точное соотношение между эффективным модулем Юнга и эффективным коэффициентом диффузии.

1.8.3. Влияние сегрегации на перекрестные соотношения

Сравнение приближенных перекрестных соотношений с точными, полученными в рамках схемы Максвелла, представлено на Рис. 1.15; $E_0 = 208$ ГПа. При сравнении результатов предполагалось, что $\alpha s = 0$, что справедливо при $D_1^* \rightarrow \infty$. Поскольку зависимость податливость-диффузия ближе к зависимости, установленной в рамках схемы Максвелла, предпочтительнее, по всей видимости, использовать соотношения податливость-диффузия, рассмотрением которых и ограничимся далее.

В отличие от эффективных податливости и тепло- или электропроводности материала, для которых общими микроструктурными параметрами действительно являются только рассмотренные выше ϕ и ω , коэффициент диффузии материала зависит также от параметра сегрегации, тогда как податливость – нет. В связи с этим возникает вопрос о принципиальной применимости соотношений между упругими и диффузионными свойствами. Помимо этого, для пористого материала справедливо предположение $^4S_1 \rightarrow \infty$, а так-

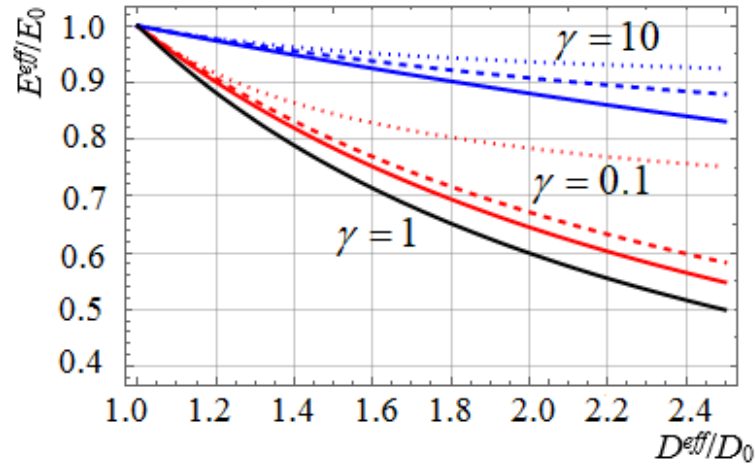


Рис. 1.15. Сравнение приближенных соотношений податливость-диффузия (пунктирные линии) и податливость-сопротивляемость (точечные линии) с точными, полученными в рамках схемы Максвелла (сплошные линии)

же устремление к бесконечности проводимости пор, в то время как коэффициент диффузии поры ограничен. В результате, соотношения податливость-диффузия зависят от величины $\alpha s = sD_0/D_1 = D_0/D_1^*$.

Из Рис. 1.16, построенного при $\alpha = 0.05$ видно, что параметр сегрегации не оказывает заметного влияния на перекрестные соотношения между модулем Юнга и коэффициентом диффузии материала со сферическими порами (которые в данном случае являются точными). Тем не менее, согласно зависимостям, изображенным на Рис. 1.17, в случае сплюснутых или вытянутых сфероидальных пор соотношения существенно зависят от сегрегации, что накладывает ограничение на их применимость. При этом приближенные соотношения близки к точным, что говорит об их корректности.

Таким образом, установленные по аналогии с проводимостью соотношения податливость-диффузия не могут быть использованы для определения одних свойств через другие при отсутствии информации о значении параметра сегрегации.

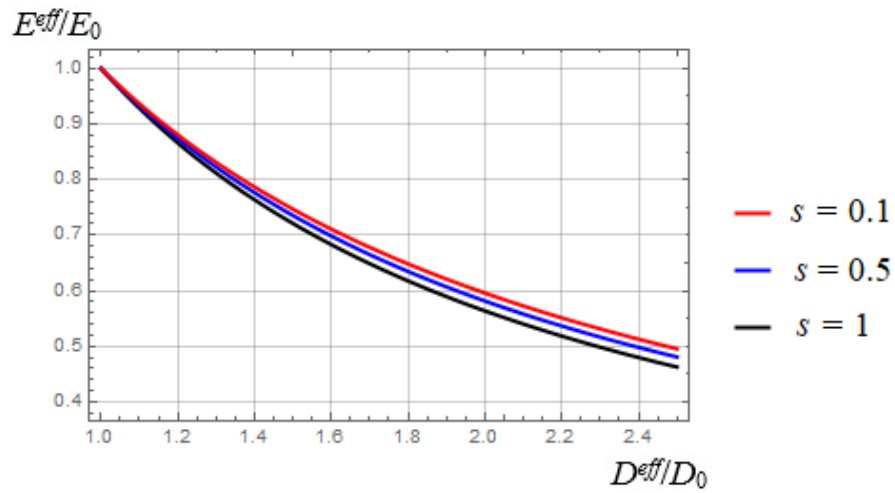


Рис. 1.16. Соотношения податливость-диффузия для материала со сферическими порами

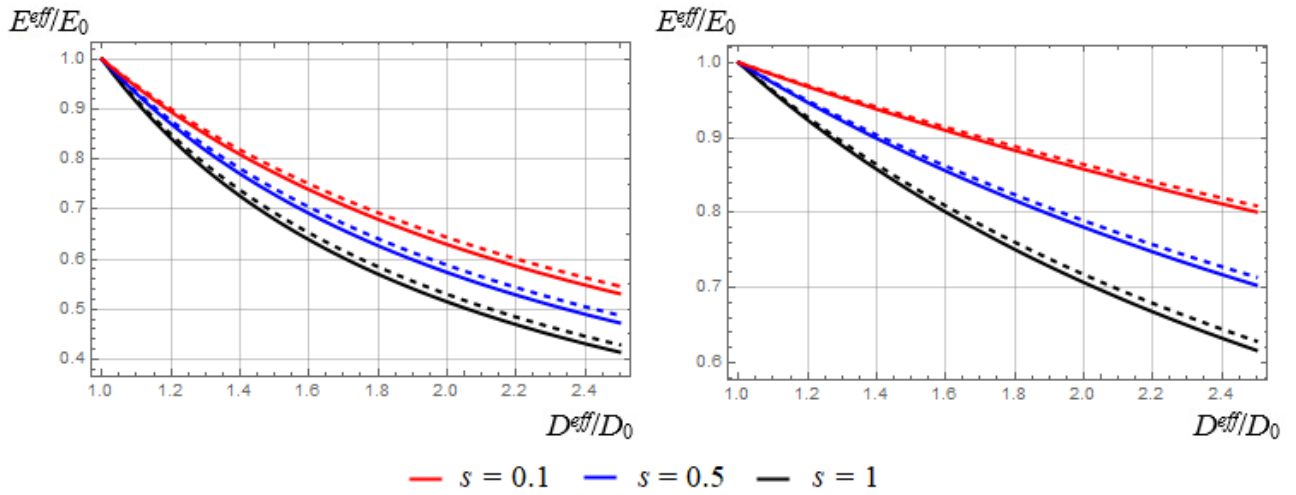


Рис. 1.17. Соотношения податливость-диффузия для материала со сплюснутыми (слева) и вытянутыми (справа) сфероидальными порами: точные соотношения (сплошные линии) и приближенные соотношения (пунктирные линии)

1.9. Основные результаты

- Решена задача об осреднении полей в контексте задачи диффузии для материала, содержащего неоднородности с неидеальным контактом — скачком концентрации на границе раздела фаз.
- Получены тензоры вклада сфероидальной неоднородности с неидеаль-

ным контактом в диффузионные свойства материала.

- Построены границы эффективных коэффициентов диффузии композита с учетом эффекта сегрегации.
- Методы эффективного поля обобщены для учета сегрегации при определении эффективных диффузионных свойств композита.
- Определены эффективные коэффициенты диффузии трансверсально-изотропного пористого материала, анизотропия которого обусловлена формой и ориентацией пор, с учетом эффекта сегрегации.
- Показано, что увеличение скачка концентрации на границе раздела фаз композита приводит к увеличению эффективного тензора диффузии и уменьшению границ применимости методов Максвелла и Канауна-Левина.
- Установлены перекрестные соотношения между эффективными упругими и диффузионными свойствами гетерогенного материала. Показано, что в случае несферических неоднородностей данные соотношения зависят от параметра сегрегации, что ограничивает их применимость.

Глава 2

Моделирование поверхностного эффекта в рамках микрополярной теории

Наличие дефектов в материале оказывает непосредственное влияние на его поведение на мезоуровне, являющемся промежуточным между микро- и макромасштабным. Как правило, именно вблизи поверхностей металлов имеется большое количество дефектов, возникающих в процессе изготовления и дальнейшей обработки, в результате чего в материале наблюдаются поверхностные эффекты различной природы. В частности, в литературе активно обсуждается явление локализованной пластической деформации [5, 13, 135]. В контексте проблемы массопереноса, наличие поверхностного слоя с большим количеством дефектов может привести к существенно неравномерному распределению диффундирующего вещества в материале. Значительное локальное увеличение концентрации вблизи поверхности наблюдается при насыщении стальных изделий водородом [60, 113, 137, 160].

Влияние водорода на свойства конструкционных материалов исследуют с помощью искусственного насыщения этих материалов. Как правило, предполагается, что для равномерного насыщения образца водородом достаточно нескольких десятков часов, а потому при реализации стандартных методов насыщения фактическое распределение водорода по толщине образца не проверяется [160]. Однако, согласно прямым измерениям, насыщение в течение стандартного времени приводит к наводороживанию только тонкого поверх-

ностного слоя порядка характерного размера зерна [47,49,80,113,137,160]. Согласно фактографическому анализу поверхностей разрушения насыщенных образцов после усталостных испытаний, размеры области, характеризующейся хрупким видом излома (именно такой излом наблюдается в насыщенных водородом областях), сопоставимы с характерным размером зерна [61, 72].

Поскольку поверхностный эффект при насыщении металлов и сплавов водородом, как правило, игнорируется, моделированию данного эффекта на сегодняшний день посвящено лишь незначительно количество работ [79,80,137,157]. Представленные в этих работах модели можно условно разделить на две группы в зависимости от того, что рассматривается в качестве причины наблюдаемого экспериментально явления. В первом случае в качестве причины рассматривается наличие “исходного” поверхностного слоя, микроструктура которого отлична от микроструктуры основного объема материала. При этом “исходный” поверхностный слой может содержать большое количество вакансий [80] или неравномерно распределенный диффузно-подвижный водород, который затем перераспределяется между диффузно-подвижным и связанным состоянием, характеризующимися различными энергиями связи [137]. Несомненным преимуществом этих моделей является то, что они учитывают специфику транспорта водорода, объясняют существенное локальное увеличение концентрации примеси вблизи поверхности и наблюдаемое экспериментально “запирание” водорода в этой области. Тем не менее, они не объясняют появление “исходного” поверхностного слоя. Вторая группа моделей в качестве причины явления рассматривает напряженно-деформированное состояние насыщаемого материала [79,157]. При этом модели учитывают либо собственные деформации, вызванные накоплением водорода, либо совокупное влияние собственных деформаций и внешней нагрузки. Эти модели позволяют описать локальное увеличение концентрации, однако, они игнорируют влияние микроструктуры поверхностного слоя, в результате чего эффект ло-

кализации водорода не столь выражен. Помимо этого, существенное локальное увеличение концентрации наблюдается и в ненагруженных образцах, а потому данные модели не позволяют учесть всю природу явления.

В диссертационной работе предлагается модель для описания существенного локального увеличения концентрации водорода в поверхностном слое, объединяющая основные идеи изложенных выше подходов и учитывающая их взаимосвязь. Предполагается, что поверхностный эффект вызван наличием даже в ненасыщенном твердом теле поверхностного слоя, поведение которого отлично от поведения основного объема материала. При этом учитывается, что напряженно-деформированное состояние поверхностного слоя связано с его структурными особенностями. Такой подход позволяет в полной мере учесть процессы, происходящие на мезоуровне.

Глава посвящена описанию поведения поверхностного слоя ненасыщенного водородом стандартного цилиндрического образца. Таким образом, в главе описывается формирование “исходного” поверхностного слоя, наличие которого может привести к различным поверхностным эффектам – в том числе, к поверхностному эффекту при наводороживании.

Поведение цилиндрического образца моделируется в рамках микрополярной теории, областью практического применения которой является в том числе описание зернистых материалов [23, 65, 124]. Основные положения микрополярной теории представлены в современных обзорах [35, 63, 114]. Выбор микрополярной теории обусловлен ограниченными вычислительными возможностями при моделировании поведения материала на разных масштабных уровнях [23]. Так, для учета неоднородностей структуры в явном виде необходимо сформулировать и решить неоднородную задачу, учитывающую большие контрасты свойств материала, неоднородность напряженно-деформированного состояния на мезо- и микромасштабе и т.д. Для упрощения постановки и решения задачи можно рассмотреть характерную неоднородность

(зерно) как тело-точку. Неоднородное распределение силовой нагрузки в масштабе зерна в этом случае приведет к появлению на макроуровне и силы, и момента. Таким образом, наделение частицы среды не только трансляционными, но и вращательными степенями свободы, позволяет описать неявно неоднородность напряженно-деформированного состояния материала на меньшем масштабе. Применение микрополярной теории приводит к возрастанию вклада моментных напряжений в области больших градиентов напряжений и деформаций на меньшем масштабном уровне. Именно такой областью является поверхностный слой. Таким образом, выбор микрополярной теории обусловлен, с одной стороны, возможностью учета взаимодействия структурных неоднородностей материала (зерен), с другой стороны – применимостью к описанию размерных эффектов.

Результаты главы 2 опубликованы в работах [6, 16, 38, 72, 75].

2.1. Основные уравнения микрополярной теории упругости

2.1.1. Общая микрополярная теория

Движение частиц микрополярной среды описывается вектором перемещений $\mathbf{u}$ и независимым вектором микроповорота $\boldsymbol{\theta}$. Деформация геометрически линейного континуума определяется тензором деформации растяжения-сжатия $\boldsymbol{\epsilon}$ и тензором деформации изгиба-кручения $\boldsymbol{\kappa}$, которые могут быть введены следующим образом:

$$\boldsymbol{\epsilon} = \nabla \mathbf{u} + \mathbf{I} \times \boldsymbol{\theta}, \quad (2.1.1)$$

$$\boldsymbol{\kappa} = \nabla \boldsymbol{\theta}, \quad (2.1.2)$$

где $\mathbf{I}$ – единичный тензор второго ранга, ∇ – набла-оператор, оператор “ $\times$ ” обозначает векторное произведение (в частности, векторное произведение произвольного тензора второго ранга $\mathbf{A} = \mathbf{a}_k \mathbf{b}_k$ и вектора $\mathbf{c}$ определяется как $\mathbf{A} \times \mathbf{c} = \mathbf{a}_k (\mathbf{b}_k \times \mathbf{c})$, здесь и далее по повторяющемуся индексу идет суммирование от 1 до 3 в соответствии с правилом суммирования Эйнштейна).

Плотность энергии упругой деформации физически линейного континуума W является квадратичной функцией мер деформации:

$$W = \frac{1}{2} \epsilon \cdot \cdot {}^4\mathbf{C} \cdot \cdot \epsilon + \epsilon \cdot \cdot {}^4\mathbf{B} \cdot \cdot \kappa + \frac{1}{2} \kappa \cdot \cdot {}^4\mathbf{D} \cdot \cdot \kappa, \quad (2.1.3)$$

где ${}^4\mathbf{C}$, ${}^4\mathbf{B}$, и ${}^4\mathbf{D}$ – тензоры упругих модулей.

Для изотропного материала тензор ${}^4\mathbf{B} = \mathbf{0}$, а тензоры ${}^4\mathbf{C}$ и ${}^4\mathbf{D}$ могут быть представлены как линейные комбинации изотропных тензоров четвертого ранга ${}^4\mathbf{I}_1 = \mathbf{\Pi}$, ${}^4\mathbf{I}_2 = \mathbf{e}_k \mathbf{I} \mathbf{e}_k$ и ${}^4\mathbf{I}_3 = \mathbf{e}_k \mathbf{e}_m \mathbf{e}_k \mathbf{e}_m$:

$$\begin{aligned} {}^4\mathbf{C} &= \lambda {}^4\mathbf{I}_1 + 2\mu {}^4\mathbf{E} + \kappa \frac{{}^4\mathbf{I}_3 - {}^4\mathbf{I}_2}{2}, \\ {}^4\mathbf{D} &= \beta_1 {}^4\mathbf{I}_1 + (\beta_2 + \beta_3) {}^4\mathbf{E} + (\beta_3 - \beta_2) \frac{{}^4\mathbf{I}_3 - {}^4\mathbf{I}_2}{2}, \end{aligned} \quad (2.1.4)$$

где ${}^4\mathbf{E} = ({}^4\mathbf{I}_2 + {}^4\mathbf{I}_3)/2$; λ и μ – параметры Ламе (μ совпадает с модулем сдвига), κ и β_i ($i = 1, 2, 3$) – неклассические упругие модули.

Четыре неклассических упругих модуля могут быть выражены через инженерные (технические) константы следующим образом:

$$\begin{aligned} N &= \sqrt{\frac{\kappa}{2\mu + \kappa}}, \quad N \in [0, 1]; \quad \psi = \frac{\beta_2 + \beta_3}{\beta_1 + \beta_2 + \beta_3}, \quad \psi \in [0, 1.5]; \\ l_t &= \sqrt{\frac{\beta_2 + \beta_3}{2\mu}}; \quad l_b = \sqrt{\frac{\beta_3}{4\mu}}, \end{aligned} \quad (2.1.5)$$

где N – параметр асимметрии, ψ – полярный коэффициент, l_t и l_b – характерные длины для деформации кручения и деформации изгиба соответственно.

Безразмерный параметр N характеризует степень асимметрии сдвиговых напряжений. Максимальное значение $N = 1$ свойственно микрополярной среде со стесненным вращением. Характерные длины для деформаций кручения l_t и изгиба l_b определяют область действия моментных напряжений, т.е. характеризуют “размерный эффект”. Полярный коэффициент ψ определяет соотношение между упругими модулями β_1 , β_2 и β_3 . При обращении в ноль неклассических упругих модулей κ и β_i модель микрополярной среды тождественна модели классической среды.

Подстановка выражений для тензоров упругих модулей (2.1.4) в уравнение (2.1.3) приведет к следующему выражению для плотности энергии упругой деформации:

$$W = \frac{\lambda}{2} \text{tr}^2(\boldsymbol{\epsilon}) + \frac{2\mu + \kappa}{4} \text{tr}(\boldsymbol{\epsilon} \cdot \boldsymbol{\epsilon}^\top) + \frac{2\mu - \kappa}{4} \text{tr}(\boldsymbol{\epsilon} \cdot \boldsymbol{\epsilon}) + \quad (2.1.6)$$

$$+ \frac{\beta_1}{2} \text{tr}^2(\boldsymbol{\kappa}) + \frac{\beta_3}{2} \text{tr}(\boldsymbol{\kappa} \cdot \boldsymbol{\kappa}^\top) + \frac{\beta_2}{2} \text{tr}(\boldsymbol{\kappa} \cdot \boldsymbol{\kappa}),$$

где $\text{tr} \mathbf{A}$ означает первый инвариант (след) тензора $\mathbf{A}$, верхний индекс $\top$ означает транспонирование тензора, оператор “ $\cdot$ ” обозначает скалярное произведение (в частности, скалярное произведение произвольных тензоров второго ранга $\mathbf{A} = \mathbf{a}_k \mathbf{b}_k$ и $\mathbf{B} = \mathbf{c}_m \mathbf{d}_m$ определяется как $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = \mathbf{a}_k (\mathbf{b}_k \cdot \mathbf{c}_m) \mathbf{d}_m$).

Квадратичная форма (2.1.6) должна быть неотрицательна, что накладывает следующие ограничения на упругие модули:

$$3\lambda + 2\mu \geq 0, \quad \mu \geq 0, \quad \kappa \geq 0,$$

$$3\beta_1 + \beta_2 + \beta_3 \geq 0, \quad \beta_2 + \beta_3 \geq 0, \quad \beta_3 - \beta_2 \geq 0.$$

Передача силовых взаимодействий между элементами микрополярной среды происходит как посредством вектора сил, так и посредством вектора моментов. Соответствующие тензоры силовых напряжений $\mathbf{T}$ и моментных напряжений $\mathbf{M}$ могут быть определены как частные производные скалярно-

значной функции W по тензорным аргументам ϵ и κ соответственно:

$$\mathbf{T} = \frac{\partial W}{\partial \epsilon} = \lambda \text{tr}(\epsilon) \mathbf{I} + 2\mu \epsilon^S + \kappa \epsilon^A, \quad (2.1.7)$$

$$\mathbf{M} = \frac{\partial W}{\partial \kappa} = \beta_1 \text{tr}(\kappa) \mathbf{I} + (\beta_2 + \beta_3) \kappa^S + (\beta_3 - \beta_2) \kappa^A, \quad (2.1.8)$$

где верхние индексы S and A определяют соответственно симметричную и антисимметричную часть тензора.

Подставив в определяющие соотношения (2.1.7)–(2.1.8) выражения для тензоров деформаций (2.1.1)–(2.1.2), а также представив упругие модули через технические константы в соответствии с формулами (2.1.5), получим следующие представления для тензоров силовых и моментных напряжений:

$$\mathbf{T} = \lambda (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} + \frac{\mu}{1 - N^2} \nabla \mathbf{u} + \mu \frac{1 - 2N^2}{1 - N^2} \mathbf{u} \nabla + 2\mu \frac{N^2}{1 - N^2} \mathbf{I} \times \boldsymbol{\theta}, \quad (2.1.9)$$

$$\mathbf{M} = 2\mu l_t^2 \frac{1 - \psi}{\psi} (\nabla \cdot \boldsymbol{\theta}) \mathbf{I} + 4\mu l_b^2 \nabla \boldsymbol{\theta} + 2\mu (l_t^2 - 2l_b^2) \boldsymbol{\theta} \nabla. \quad (2.1.10)$$

Поведение микрополярной среды определяется балансом количества движения и балансом кинетического момента, которые в отсутствие распределенных сил и моментов имеют следующий интегральный вид:

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \mathbf{v} dV = \int_S \mathbf{n} \cdot \mathbf{T} dS, \quad (2.1.11)$$

$$\frac{d}{dt} \int_V (\mathbf{r} \times \rho \mathbf{v} + \rho J \boldsymbol{\omega}) dV = \int_S (\mathbf{r} \times (\mathbf{n} \cdot \mathbf{T}) + \mathbf{n} \cdot \mathbf{M}) dS, \quad (2.1.12)$$

где V – контрольный объем, ограниченный поверхностью S , d/dt – полная производная по времени, ρ – массовая плотность, $\mathbf{v}$ – трансляционная скорость частицы среды, $\mathbf{r}$ – радиус-вектор частицы среды, J – массовая плотность момента инерции, $\boldsymbol{\omega}$ – угловая скорость частицы среды.

При решении динамической задачи уравнения движения в локальной фор-

ме принимают следующий вид:

$$\rho \ddot{\mathbf{u}} = \nabla \cdot \mathbf{T}, \quad (2.1.13)$$

$$\rho J \ddot{\boldsymbol{\theta}} = \nabla \cdot \mathbf{M} + \mathbf{T}_{\times}, \quad (2.1.14)$$

где $\ddot{\boldsymbol{\theta}}$ обозначает вторую производную по времени, нижний индекс “ $\times$ ” обозначает векторный инвариант тензора ($\mathbf{A}_{\times} = (\mathbf{a}_k \mathbf{b}_k)_{\times} = \mathbf{a}_k \times \mathbf{b}_k$). Баланс кинетического момента в локальной форме (2.1.14) получен с учетом баланса количества движения (2.1.13).

При решении задачи статики уравнения равновесия в локальной форме принимают вид

$$\nabla \cdot \mathbf{T} = 0, \quad (2.1.15)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{M} + \mathbf{T}_{\times} = 0. \quad (2.1.16)$$

Решение задачи общей микрополярной теории упругости будет определяться в дальнейшем и аналитически, и численно. Не останавливаясь на данном этапе изложения подробно на особенностях численного метода, отметим, что для получения более точного решения необходимо, чтобы численный метод, помимо непосредственно аппроксимации с той или иной точностью исходных уравнений, обеспечивал строгое выполнение физических законов сохранения (был консервативным [143]). Консервативность интегральных характеристик системы (в контексте рассматриваемой задачи такими характеристиками являются количество движения и кинетический момент) обеспечивается исходными интегральными уравнениями, тогда как форма дифференциальных уравнений влияет на свойства консервативности. В частности, раскрытие скобок в дифференциальных уравнениях может привести к неконсервативному виду дифференциальных уравнений, а потому должно быть сведено к минимуму. Для получения в дальнейшем дифференциальных уравнений в цилиндрической системе координат (r, φ, z) определим действие

набла-оператора на произвольную тензорную функцию Φ , осуществив предельный переход в соотношении $\int_V \nabla * \Phi dV = \int_S \mathbf{n} * \Phi dS$ для элементарного объема (оператор “*” в общем случае может означать скалярное, векторное и тензорное умножение):

$$\nabla * \Phi = \frac{1}{r} \mathbf{e}_r * \frac{\partial}{\partial r} (r\Phi) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} (\mathbf{e}_\varphi * \Phi) + \mathbf{e}_z * \frac{\partial \Phi}{\partial z}. \quad (2.1.17)$$

Отметим, что при раскрытии скобок формула (2.1.17) сводится к общеизвестному виду

$$\nabla * \Phi = \mathbf{e}_r * \frac{\partial \Phi}{\partial r} + \frac{1}{r} \mathbf{e}_\varphi * \frac{\partial \Phi}{\partial \varphi} + \mathbf{e}_z * \frac{\partial \Phi}{\partial z}.$$

2.1.2. Теория моментных напряжений

Рассмотрим отдельно частный случай микрополярного континуума – микрополярную среду со стесненным вращением, в которой моментные взаимодействия между частицами среды вводятся наряду с силовыми, но вращательные степени свободы не рассматриваются.

Тензор деформации ϵ определяется выражением (2.1.1), которое для дальнейших преобразований удобно представить в виде суммы симметричной и антисимметричной частей:

$$\epsilon = \varepsilon + \mathbf{I} \times (\boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\omega}), \quad (2.1.18)$$

где $\varepsilon = \epsilon^S = (\nabla \mathbf{u} + \mathbf{u} \nabla) / 2$ совпадает с линейным тензором деформации, вводимым в рамках классической теории, $\boldsymbol{\omega} = \nabla \times \mathbf{u} / 2$ – вектор макроравотворота, характеризующий вращение, связанное с поступательным движением соседних частиц среды.

Используя представление тензора деформации (2.1.18), можно переписать определяющее соотношение для тензора силовых напряжений (2.1.7) следу-

ющим образом:

$$\mathbf{T} = \lambda \text{tr}(\boldsymbol{\epsilon}) \mathbf{I} + 2\mu \boldsymbol{\epsilon} + \kappa \mathbf{I} \times (\boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\omega}). \quad (2.1.19)$$

В микрополярной среде со стесненным вращением вектор микроповорота совпадает с вектором макropоворота:

$$\boldsymbol{\theta} = \boldsymbol{\omega} = \frac{1}{2} \nabla \times \mathbf{u}. \quad (2.1.20)$$

В результате, из формулы (2.1.18) следует, что тензор деформации $\boldsymbol{\epsilon}$ является симметричным и совпадает с тензором деформации, вводимым в рамках классической теории:

$$\boldsymbol{\epsilon} = \boldsymbol{\epsilon} = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u} + \mathbf{u} \nabla). \quad (2.1.21)$$

В рамках теории моментных напряжений тензор силовых напряжений является асимметричным, а неклассический модуль упругости $\kappa \rightarrow \infty$. В результате, согласно выражению (2.1.19), антисимметричная часть тензора напряжений представляет собой неопределенность вида $0 \cdot \infty$ и не может быть найдена из определяющего соотношения. В связи с этим, тензор силовых напряжений представляется в виде суммы симметричной и антисимметричной частей. Симметричная часть находится из определяющего соотношения, тогда как антисимметричная - из баланса кинетического момента:

$$\begin{aligned} \mathbf{T} &= \mathbf{T}^S + \mathbf{T}^A, \\ \mathbf{T}^S &= \lambda \text{tr}(\boldsymbol{\epsilon}) \mathbf{I} + 2\mu \boldsymbol{\epsilon} = \lambda (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} + \mu (\nabla \mathbf{u} + \mathbf{u} \nabla), \\ \mathbf{T}^A &= -\frac{1}{2} \mathbf{I} \times \mathbf{T}_{\times} = \frac{1}{2} \mathbf{I} \times (\nabla \cdot \mathbf{M}). \end{aligned} \quad (2.1.22)$$

Тензор моментных напряжений находится из определяющего соотноше-

ния (2.1.8) и, с учетом (2.1.20), принимает вид:

$$\begin{aligned}\mathbf{M} &= \frac{1}{2} [\beta_2 (\nabla \times \mathbf{u}) \nabla + \beta_3 \nabla (\nabla \times \mathbf{u})] = \\ &= \mu [(l_t^2 - 2l_b^2) (\nabla \times \mathbf{u}) \nabla + 2l_b^2 \nabla (\nabla \times \mathbf{u})].\end{aligned}\quad (2.1.23)$$

Поведение материала в результате будет определяться одним уравнением равновесия (балансом количества движения с учетом того, что антисимметричная часть тензора силовых напряжений выражается из баланса кинетического момента):

$$\nabla \cdot \mathbf{T}^S + \frac{1}{2} \nabla \times (\nabla \cdot \mathbf{M}) = 0. \quad (2.1.24)$$

Решение задачи теории моментных напряжений будет определяться в дальнейшем только аналитически, а потому нет необходимости в получении консервативных дифференциальных уравнений. Для поиска аналитического решения удобнее всего работать в дальнейшем напрямую с уравнением равновесия в перемещениях, которое с учетом соотношений (2.1.22), (2.1.23) принимает вид

$$(\lambda + \mu) \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}) + \mu \Delta \mathbf{u} + \mu l_b^2 \nabla \cdot \Delta (\mathbf{u} \nabla - \nabla \mathbf{u}) = 0. \quad (2.1.25)$$

2.2. Краевая задача для длинного цилиндра

Напряженно-деформированное состояние определяется для длинного цилиндра радиуса r_0 и длины L .

Введение независимых трансляционных и вращательных степеней свободы, а также учет моментных взаимодействий между частицами среды наряду с силовыми приводят к необходимости формулировки дополнительных граничных условий, которые в общем случае могут быть кинематическими, статическими или смешанными. Кинематическое граничное условие предполагает задание микроповоротов на внешней поверхности, а статическое гра-

ничное условие – задание момента.

Выбор конкретного дополнительного граничного условия не всегда очевиден, поскольку измерить напрямую момент на поверхности невозможно, а для задания микроповоротов необходимо представление не только о разворотах поверхностных элементов друг относительно друга, но и относительно внутренних элементов. При выборе граничного условия будем исходить из того, что частица микрополярной среды в контексте решаемой задачи представляет собой зерно (или его фрагмент). Известно, что на внешней поверхности металлических изделий наблюдаются развороты и “выпучивание” зерен [164]. Границы зерен, образующие поверхность материала, свободны от внешней нагрузки, тогда как подвижность “внутренних” границ этих зерен ограничена соседними зернами, что приводит к сильно неравномерной силовой нагрузке в масштабе зерна, которую можно интерпретировать как момент на макроуровне, являющийся причиной разворотов. С другой стороны, при наличии данных о разворотах внешних и внутренних зерен, основанных на микроструктурном анализе, было бы целесообразнее задавать на поверхности именно микроповороты. Для полноты картины ниже будут рассмотрены оба типа граничных условий.

Дополнительное кинематическое граничное условие задается на боковой поверхности цилиндра как

$$\theta|_{r=r_0} = \theta_0,$$

статическое граничное условие вводится следующим образом:

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{M}|_{r=r_0} = \mathbf{M}_0,$$

где $\mathbf{n}$ – внешняя нормаль к поверхности.

Предположим, что граничное условие на боковой поверхности не зависит от координат z и φ , т.е. $\theta_0 = \text{const}$ или $\mathbf{M}_0 = \text{const}$. Учтем также, что на

боковой поверхности наблюдается, в основном, “выпучивание” зерен, и при задании кинематического граничного условия ограничимся заданием поворота вокруг орта $\mathbf{e}_\varphi$:

$$\boldsymbol{\theta}|_{r=r_0} = \boldsymbol{\theta}_0 = \theta_0 \mathbf{e}_\varphi; \quad (2.2.1)$$

а при задании статического граничного условия ограничимся заданием изгибающего момента вокруг $\mathbf{e}_\varphi$:

$$\mathbf{e}_r \cdot \mathbf{M}|_{r=r_0} = \mathbf{M}_0 = M_0 \mathbf{e}_\varphi. \quad (2.2.2)$$

Боковая поверхность цилиндра считается свободной от силовой нагрузки, т.е.

$$\mathbf{e}_r \cdot \mathbf{T}|_{r=r_0} = \mathbf{0}. \quad (2.2.3)$$

Согласно принципу Сен-Венана, напряженно-деформированное состояние в длинном цилиндре практически не зависит от распределения действующих на торцах поверхностных сил и моментов [18]. На некотором удалении от торцов напряженное состояние определяется только главной силой и главным моментом. Таким образом, краевые условия на торцах выполняются интегрально. Цилиндр не нагружен в осевом направлении, поэтому выполняются следующие условия:

$$\int \int_S \mathbf{e}_z \cdot \mathbf{T} dS \Big|_{z=0, z=L} = 0, \quad (2.2.4)$$

$$\int \int_S \mathbf{e}_z \cdot \mathbf{M} dS \Big|_{z=0, z=L} = 0. \quad (2.2.5)$$

2.2.1. Микрополярная среда

Учитывая аксиальную симметрию и предполагая, что все сечения цилиндра ведут себя одинаково, будем искать решение задачи в рамках общей мик-

рополярной теории в следующем виде:

$$\mathbf{u} = u_r(r) \mathbf{e}_r + u_z(r) \mathbf{e}_z, \quad (2.2.6)$$

$$\boldsymbol{\theta} = \theta_r(r) \mathbf{e}_r + \theta_\varphi(r) \mathbf{e}_\varphi. \quad (2.2.7)$$

Предположим ограниченность радиальных перемещений

$$u_r|_{r=0} \ll \infty \quad (2.2.8)$$

и зафиксируем положение оси цилиндра

$$u_z|_{r=0} = 0, \quad (2.2.9)$$

$$\theta_r|_{r=0} = \theta_\varphi|_{r=0} = 0. \quad (2.2.10)$$

Из определяющего соотношения (2.1.9) следует, что ненулевые компоненты тензора силовых напряжений $\mathbf{T}$ будут иметь вид

$$\begin{aligned} T_{rr} &= (\lambda + 2\mu) u'_r + \lambda \frac{u_r}{r}, \quad T_{\varphi\varphi} = \lambda u'_r + (\lambda + 2\mu) \frac{u_r}{r}, \\ T_{zz} &= \lambda \left(u'_r + \frac{u_r}{r} \right), \\ T_{z\varphi} &= -T_{\varphi z} = 2\mu \frac{N^2}{1 - N^2} \theta_r, \\ T_{zr} &= \frac{\mu}{1 - N^2} \left((1 - 2N^2) u'_z - 2N^2 \theta_\varphi \right), \quad T_{rz} = \frac{\mu}{1 - N^2} \left(u'_z + 2N^2 \theta_\varphi \right), \end{aligned} \quad (2.2.11)$$

а из определяющего соотношения (2.1.10) следует, что ненулевые компоненты тензора моментных напряжений $\mathbf{M}$ будут выражаться через микроповороты следующим образом:

$$\begin{aligned} M_{rr} &= \frac{2\mu l_t^2}{\psi} \left[\theta'_r + (1 - \psi) \frac{\theta_r}{r} \right], \quad M_{\varphi\varphi} = \frac{2\mu l_t^2}{\psi} \left[(1 - \psi) \theta'_r + \frac{\theta_r}{r} \right], \\ M_{r\varphi} &= 2\mu \left[(2l_b^2 - l_t^2) \frac{\theta_\varphi}{r} + 2l_b^2 \theta'_\varphi \right], \quad M_{\varphi r} = 2\mu \left[(l_t^2 - 2l_b^2) \theta'_\varphi - 2l_b^2 \frac{\theta_\varphi}{r} \right]. \end{aligned} \quad (2.2.12)$$

где $'$ обозначает производную по радиусу $\partial/\partial r$.

Для записи балансовых соотношений в компонентном виде найдем проекции векторного уравнения (2.1.15) на орты $\mathbf{e}_z$, $\mathbf{e}_r$ и проекции векторного уравнения (2.1.16) на орты $\mathbf{e}_r$, $\mathbf{e}_\varphi$, соответственно:

$$\begin{aligned}(rT_{rz})' &= 0, \\ (rT_{rr})' - T_{\varphi\varphi} &= 0, \\ (rM_{rr})' - M_{\varphi\varphi} + rT_{\varphi z} - rT_{z\varphi} &= 0, \\ (rM_{r\varphi})' + M_{\varphi r} + rT_{zr} - rT_{rz} &= 0.\end{aligned}\tag{2.2.13}$$

Подставив определяющие соотношения (2.2.11)–(2.2.12) в уравнения равновесия (2.2.13), получим следующую систему дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned}(ru_z')' + 2N^2(r\theta_\varphi)' &= 0, \\ (ru_r')' - \frac{u_r}{r} &= 0, \\ \frac{l_t^2}{\psi} \left[(r\theta_r')' - \frac{\theta_r}{r} \right] - r \frac{2N^2}{1 - N^2} \theta_r &= 0, \\ 2l_b^2 \left[(r\theta_\varphi')' - \frac{\theta_\varphi}{r} \right] - r \frac{2N^2}{1 - N^2} \theta_\varphi - r \frac{N^2}{1 - N^2} u_z' &= 0.\end{aligned}\tag{2.2.14}$$

Видно, что уравнения (2.2.14)₂ относительно радиальных перемещений и (2.2.14)₃ относительно микроповорота вокруг $\mathbf{e}_r$ независимы, а уравнения (2.2.14)₁, (2.2.14)₄ образуют систему относительно двух неизвестных: аксиального перемещения и микроповорота вокруг $\mathbf{e}_\varphi$. При этом учет граничных условий (2.2.3), (2.2.8) приводит тривиальному (тождественно равному нулю) решению уравнения (2.2.14)₂, т.е. $u_r = 0$. Аналогично, из граничных условий (2.2.10) и (2.2.1) или (2.2.2) следует тривиальное решение уравнения (2.2.14)₃, т.е. $\theta_r = 0$. Таким образом, система дифференциальных уравнений (2.2.14)

сводится к системе двух уравнений

$$\begin{aligned} (ru_z')' + 2N^2 (r\theta_\varphi)' &= 0, \\ 2l_b^2 \left[(r\theta_\varphi')' - \frac{\theta_\varphi}{r} \right] - r \frac{2N^2}{1-N^2} \theta_\varphi - r \frac{N^2}{1-N^2} u_z' &= 0. \end{aligned} \quad (2.2.15)$$

По сути, данная система дифференциальных уравнений будет аппроксимироваться в дальнейшем при разработке численного метода.

Система дифференциальных уравнений (2.2.15) может быть упрощена за счет раскрытия скобок. Поделив уравнения на r , получим

$$\begin{aligned} u_z'' + \frac{u_z'}{r} + 2N^2 \left(\theta_\varphi' + \frac{\theta_\varphi}{r} \right) &= 0, \\ 2l_b^2 \left(\theta_\varphi'' + \frac{\theta_\varphi'}{r} - \frac{\theta_\varphi}{r^2} \right) - \frac{N^2}{1-N^2} u_z' - \frac{2N^2}{1-N^2} \theta_\varphi &= 0. \end{aligned} \quad (2.2.16)$$

Данная система будет использоваться при поиске аналитического решения.

2.2.2. Микрополярная среда со стесненным вращением

Учитывая аксиальную симметрию и предполагая, что все сечения цилиндра ведут себя одинаково, будем искать решение задачи в рамках теории моментных напряжений в следующем виде:

$$\mathbf{u} = u_r(r) \mathbf{e}_r + u_z(r) \mathbf{e}_z. \quad (2.2.17)$$

Предположим ограниченность радиальных перемещений и зафиксируем положение оси цилиндра:

$$u_r|_{r=0} \ll \infty, \quad u_z|_{r=0} = 0. \quad (2.2.18)$$

Для получения уравнений относительно компонент вектора перемещений, найдем проекции векторного уравнения (2.1.25) на орты $\mathbf{e}_z$, $\mathbf{e}_r$, соответствен-

но:

$$l_b^2 \left(u_z^{IV} + \frac{u_z'''}{r} - \frac{u_z''}{r^2} + \frac{u_z'}{r} \right) - u_z'' = 0, \quad (2.2.19)$$
$$u_r'' + \frac{u_r'}{r} - \frac{u_r}{r^2} = 0.$$

С учетом граничных условий (2.2.3), (2.2.18), $u_r = 0$. В результате остается одно уравнение относительно аксиальных перемещений:

$$l_b^2 \left(u_z^{IV} + \frac{u_z'''}{r} - \frac{u_z''}{r^2} + \frac{u_z'}{r} \right) - u_z'' = 0. \quad (2.2.20)$$

2.3. Аналитическое асимптотическое решение

Известно, что разница между решением задач об определении напряженно-деформированного состояния материала в рамках микрополярной теории и в рамках классической теории зависит от значений характерных длин для деформаций кручения и изгиба. Чем больше данные значения, тем существеннее вклад моментных взаимодействий между частицами среды. Значения характерных длин сопоставимы с размерами структурной неоднородности материала и, как правило, малы по сравнению с размерами образца. В связи с этим, решение, полученное в рамках микрополярной теории, можно рассматривать как поправку к классическому решению, позволяющую удовлетворить дополнительным (неклассическим) граничным условиям. Поскольку в контексте рассматриваемой в работе задачи микрополярное решение играет роль вблизи боковой поверхности цилиндра, т.е. при значениях r , близких к r_0 , можно предположить асимптотическое поведение решения микрополярной задачи, представленной системой дифференциальных уравнений (2.2.16) в случае общей микрополярной среды и дифференциальным уравнением (2.2.20) в случае микрополярной среды со стесненным вращением. Таким образом, при поиске аналитического решения будет предпола-

гаться быстрое затухание искомой функции Φ (компоненты перемещений или микроповорота) при удалении от боковой поверхности:

$$\Phi'' \gg \Phi' \gg \Phi. \quad (2.3.1)$$

Тогда с точностью до членов одного порядка малости система уравнений (2.2.16) сведется к

$$\begin{aligned} u_z'' + 2N^2\theta_\varphi' &= 0, \\ 2l_b^2\theta_\varphi'' - \frac{N^2}{1-N^2}u_z' - \frac{2N^2}{1-N^2}\theta_\varphi &= 0. \end{aligned} \quad (2.3.2)$$

Выразив из уравнения (2.3.2)₁ микроповорот вокруг $\mathbf{e}_\varphi$ через градиент перемещений как

$$\theta_\varphi = -\frac{1}{2N^2}u_z' + B_1,$$

подставив его в уравнение (2.3.2)₂ и проинтегрировав последнее, получим следующее дифференциальное уравнение относительно аксиальных перемещений:

$$l_b^2 u_z'' - N^2 u_z = -\frac{2N^4}{(1-N^2)}(B_1 r + B_2), \quad (2.3.3)$$

где B_1, B_2 – константы интегрирования.

Поскольку в уравнении (2.3.3) при старшей производной стоит малый параметр, решением уравнения будет являться решение типа пограничного слоя. Отметим, что решения типа пограничного слоя повсеместно рассматриваются в статических и динамических теориях микрополярных стержней, пластин и оболочек [62, 144]. В диссертационной работе такое решение возникает при использовании трехмерной теории упругости в предположении, что моментные взаимодействия играют роль вблизи боковой поверхности цилиндра.

Итак, решения для аксиальных перемещений и микроповоротов вокруг

$\mathbf{e}_\varphi$ имеют следующий вид:

$$u_z = A_1 e^{-\frac{Nr}{l_b}} + A_2 e^{\frac{Nr}{l_b}} + \frac{2N^2}{(1-N^2)} (B_1 r + B_2), \quad (2.3.4)$$

$$\theta_\varphi = \frac{1}{2Nl_b} \left(A_1 e^{-\frac{Nr}{l_b}} - A_2 e^{\frac{Nr}{l_b}} \right) - \frac{N^2}{1-N^2} B_1, \quad (2.3.5)$$

где A_1, A_2 – константы.

Константы интегрирования A_1, A_2, B_1, B_2 находятся из граничных условий. Поскольку боковая поверхность цилиндра свободна от силовых нагрузок (граничное условие (2.2.3)), $B_1 = 0$. Из условия равенства нулю микроповорота в центре цилиндра (2.2.10) следует, что $A_1 = A_2 = A$. Из условия равенства нулю перемещений в центре цилиндра (2.2.9) следует, что $B_2 = -A(1-N^2)/N^2$. Константа A находится из дополнительного граничного условия на боковой поверхности (2.2.1) или (2.2.2). В случае кинематического граничного условия (2.2.1) получаем окончательно следующее решение:

$$u_z = 2Nl_b \theta_0 \frac{e^{-\frac{Nr}{l_b}} + e^{\frac{Nr}{l_b}} - 2}{e^{-\frac{Nr_0}{l_b}} - e^{\frac{Nr_0}{l_b}}}, \quad (2.3.6)$$

$$\theta_\varphi = \theta_0 \frac{e^{-\frac{Nr}{l_b}} - e^{\frac{Nr}{l_b}}}{e^{-\frac{Nr_0}{l_b}} - e^{\frac{Nr_0}{l_b}}},$$

а в случае статического граничного условия (2.2.2)

$$u_z = \frac{M_0}{2\mu} \frac{2 - e^{-\frac{Nr}{l_b}} - e^{\frac{Nr}{l_b}}}{e^{-\frac{Nr_0}{l_b}} + e^{\frac{Nr_0}{l_b}}}, \quad (2.3.7)$$

$$\theta_\varphi = \frac{M_0}{4\mu Nl_b} \frac{e^{\frac{Nr}{l_b}} - e^{-\frac{Nr}{l_b}}}{e^{-\frac{Nr_0}{l_b}} + e^{\frac{Nr_0}{l_b}}}.$$

С учетом малости характерной длины для деформации изгиба l_b , можно получить следующее приближенное решение при задании на боковой поверх-

ности микроповорота:

$$u_z \approx -2Nl_b\theta_0 e^{-\frac{N}{l_b}(r_0-r)}, \quad \theta_\varphi \approx \theta_0 e^{-\frac{N}{l_b}(r_0-r)} \quad (2.3.8)$$

и

$$u_z \approx -\frac{M_0}{2\mu} e^{-\frac{N}{l_b}(r_0-r)}, \quad \theta_\varphi \approx \frac{M_0}{4\mu Nl_b} e^{-\frac{N}{l_b}(r_0-r)} \quad (2.3.9)$$

при задании на боковой поверхности распределенного момента.

Таким образом, оба типа граничных условий привели к экспоненциально затухающему при удалении от боковой поверхности решению. Разница между решениями, полученными при использовании кинематического и статического граничного условия, скорее количественная, чем качественная.

Подставляя приближенное решение (2.3.8) в выражения на тензоры деформации (2.1.1), (2.1.2) и в определяющие соотношения (2.2.11), (2.2.12), получим с учетом асимптотических предположений следующие поля деформаций и напряжений:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\epsilon} &\approx -\theta_0 e^{-\frac{N}{l_b}(r_0-r)} \left[(2N^2 - 1) \mathbf{e}_r \mathbf{e}_z + \mathbf{e}_z \mathbf{e}_r \right], \\ \boldsymbol{\kappa} &\approx \theta_0 N e^{-\frac{N}{l_b}(r_0-r)} \left[\frac{1}{l_b} \mathbf{e}_r \mathbf{e}_\varphi - \frac{1}{rN} \mathbf{e}_\varphi \mathbf{e}_r \right], \\ \mathbf{T} &\approx -4\theta_0 \mu N e^{-\frac{N}{l_b}(r_0-r)} \mathbf{e}_z \mathbf{e}_r, \\ \mathbf{M} &\approx 4\theta_0 \mu N l_b e^{-\frac{N}{l_b}(r_0-r)} \left[\frac{l_t^2 - 2l_b^2}{2l_b^2} \mathbf{e}_\varphi \mathbf{e}_r + \mathbf{e}_r \mathbf{e}_\varphi \right]. \end{aligned} \quad (2.3.10)$$

Используя приближенное решение (2.3.9), получим следующие поля:

$$\begin{aligned}
\epsilon &\approx -\frac{M_0}{4\mu l_b N} e^{-\frac{N}{l_b}(r_0-r)} \left[(2N^2 - 1) \mathbf{e}_r \mathbf{e}_z + \mathbf{e}_z \mathbf{e}_r \right], \\
\kappa &\approx \frac{M_0}{4\mu l_b} e^{-\frac{N}{l_b}(r_0-r)} \left[\frac{1}{l_b} \mathbf{e}_r \mathbf{e}_\varphi - \frac{1}{rN} \mathbf{e}_\varphi \mathbf{e}_r \right], \\
\mathbf{T} &\approx -\frac{M_0}{l_b} N e^{-\frac{N}{l_b}(r_0-r)} \mathbf{e}_z \mathbf{e}_r, \\
\mathbf{M} &\approx M_0 e^{-\frac{N}{l_b}(r_0-r)} \left[\frac{l_t^2 - 2l_b^2}{2l_b^2} \mathbf{e}_\varphi \mathbf{e}_r + \mathbf{e}_r \mathbf{e}_\varphi \right].
\end{aligned} \tag{2.3.11}$$

Таким образом, в поверхностном слое наблюдаются только сдвиговые деформации и касательные напряжения. Отметим, что граничные условия (2.2.4), (2.2.5) на торцах цилиндра выполняются автоматически.

Перейдем к решению задачи в рамках микрополярной тоерии со стесненным вращением. С учетом асимптотических предположений (2.3.1), уравнение (2.2.20) сведется к

$$l_b^2 u_z^{IV} - u_z'' = 0. \tag{2.3.12}$$

Уравнение (2.3.12) имеет решение типа пограничного слоя, поскольку при старшей производной стоит малый параметр. Проинтегрировав дважды дифференциальное уравнение (2.3.12), получим

$$l_b^2 u_z'' - u_z = \tilde{B}_1 r + \tilde{B}_2, \tag{2.3.13}$$

где $\tilde{B}_1, \tilde{B}_2$ – константы интегрирования.

Уравнение (2.3.13) имеет следующее решение:

$$u_z = \tilde{A}_1 e^{-\frac{r}{l_b}} + \tilde{A}_2 e^{\frac{r}{l_b}} - \tilde{B}_1 r - \tilde{B}_2, \tag{2.3.14}$$

где $\tilde{A}_1, \tilde{A}_2$ – константы.

Как и при решении задачи в рамках общей микрополярной задачи, из граничного условия (2.2.3) следует, что $\tilde{B}_1 = 0$, из условия (2.2.10) получа-

ем $\tilde{A}_1 = \tilde{A}_2 = \tilde{A}$, а из условия (2.2.9) определяем $\tilde{B}_2 = 2\tilde{A}$. Константа $\tilde{A}$ находится из условия (2.2.1) или (2.2.2). Окончательно получаем следующее решение для перемещений при использовании кинематического граничного условия

$$u_z = 2l_b\theta_0 \frac{e^{-\frac{r}{l_b}} + e^{\frac{r}{l_b}} - 2}{e^{-\frac{r_0}{l_b}} - e^{\frac{r_0}{l_b}}} \quad (2.3.15)$$

и

$$u_z = \frac{M_0}{2\mu} \frac{2 - e^{-\frac{r}{l_b}} - e^{\frac{r}{l_b}}}{e^{-\frac{r_0}{l_b}} + e^{\frac{r_0}{l_b}}} \quad (2.3.16)$$

при использовании статического граничного условия.

Положив в решениях (2.3.6) и (2.3.7) $N = 1$, получим, что решение задачи в рамках общей микрополярной теории сводится к решению, полученному в рамках микрополярной теории со стесненным вращением. Таким образом, общее решение предусматривает частный случай.

С учетом малости характерной длины для деформации изгиба l_b можно получить следующее приближенное решение задачи в рамках теории моментных напряжений при задании на боковой поверхности микроповорота:

$$u_z \approx -2l_b\theta_0 e^{-\frac{r_0-r}{l_b}} \quad (2.3.17)$$

и

$$u_z \approx -\frac{M_0}{2\mu} e^{-\frac{r_0-r}{l_b}} \quad (2.3.18)$$

при задании на боковой поверхности распределенного момента.

Подставляя приближенное решение (2.3.17) в выражение для тензора деформации (2.1.21) и в определяющие соотношения (2.1.22), (2.1.23), получим

следующие поля деформаций и напряжений:

$$\begin{aligned}\epsilon &\approx -\theta_0 e^{-\frac{r_0-r}{l_b}} [\mathbf{e}_r \mathbf{e}_z + \mathbf{e}_z \mathbf{e}_r], \\ \mathbf{T} &\approx -4\mu\theta_0 e^{-\frac{r_0-r}{l_b}} \mathbf{e}_z \mathbf{e}_r, \\ \mathbf{M} &\approx 4\mu l_b \theta_0 e^{-\frac{r_0-r}{l_b}} \left[\frac{l_t^2 - 2l_b^2}{2l_b^2} \mathbf{e}_\varphi \mathbf{e}_r + \mathbf{e}_r \mathbf{e}_\varphi \right].\end{aligned}\tag{2.3.19}$$

Используя приближенное решение (2.3.18), получим следующие поля:

$$\begin{aligned}\epsilon &\approx -\frac{M_0}{4\mu l_b} e^{-\frac{r_0-r}{l_b}} [\mathbf{e}_r \mathbf{e}_z + \mathbf{e}_z \mathbf{e}_r], \\ \mathbf{T} &\approx -\frac{M_0}{l_b} e^{-\frac{r_0-r}{l_b}} \mathbf{e}_z \mathbf{e}_r, \\ \mathbf{M} &\approx M_0 e^{-\frac{r_0-r}{l_b}} \left[\frac{l_t^2 - 2l_b^2}{2l_b^2} \mathbf{e}_\varphi \mathbf{e}_r + \mathbf{e}_r \mathbf{e}_\varphi \right].\end{aligned}\tag{2.3.20}$$

2.4. Определение неклассических упругих модулей

Область убывания полученного в предыдущем разделе аналитического решения определяется отношением параметра асимметрии к N характерной длине для деформации изгиба l_b . Несмотря на то, что для некоторых материалов в литературе имеются данные о неклассических параметрах, вводимых в рассмотрение в рамках микрополярной теории [30, 31, 40, 76, 100, 101, 110, 136, 145, 172], насколько нам известно, для металлов (в частности, для сталей), такие количественные данные отсутствуют. Непосредственное измерение этих параметров сопряжено со сложностью реализации экспериментов, учитывающих размерный эффект в случае, когда структурной неоднородностью является зерно малого размера.

Подойдем к проблеме определения неклассических упругих модулей с другой стороны и найдем отношение N/l_b на основании сравнения теоретических результатов и экспериментальных данных о микроструктуре материала. Из полученного в предыдущем разделе решения можно оценить размеры об-

ласти, в которой возникают напряжения и деформации. Деформации, в свою очередь, приводят к изменению структуры материала, которые, вообще говоря, можно наблюдать при микроструктурном анализе. Сравнив область убывания деформаций с шириной области, микроструктура которой отлична от микроструктуры основного объема материала, можно оценить значение неклассических упругих модулей. Разумеется, при таком подходе речь идет скорее не о малых деформациях, рассмотренных в работе. Тем не менее, использование теоретических результатов, полученных в рамках линейной теории, позволит оценить приближенно диапазон значений неклассических материальных констант.

Ограничимся рассмотрением приближенного решения (2.3.10), (2.3.11) для деформаций. Деформации цилиндра максимальны на боковой поверхности и уменьшаются по мере удаления от границы. Характер убывания определяется экспоненциальной функцией с показателем $-N(r_0 - r)/l_b$. Такой характер убывания присущ практически всем компонентам тензора деформации и, вообще говоря, перемещениям/микроповоротам, а также напряжениям. Исключение составляет компонента тензора деформации изгиба-кручения $\kappa_{\varphi r}$, изменение которой при удалении от боковой поверхности определяется более сложной зависимостью $\exp(-N(r_0 - r)/l_b)/r$. Предположим, что при удалении от боковой поверхности на расстояние r_* деформации убывают в k раз:

$$\Phi|_{r=r_*} = \frac{1}{k} \Phi|_{r=r_0},$$

где в роли Φ может выступать любая компонента тензоров деформации.

Тогда получим следующую формулу для определения отношения неклассических упругих модулей:

$$L_b = \frac{l_b}{N} = \frac{r_0 - r_*}{\ln k}. \quad (2.4.1)$$

Отметим, что для $\Phi = \kappa_{\varphi r}$ получается схожая формула

$$L_b = \frac{l_b}{N} = \frac{r_0 - r_*}{\ln(kr_0/r_*)},$$

которую можно заменить формулой (2.4.1) в связи с малой толщиной поверхностного слоя.

Очевидно, что вращение зерен в металлах ограничено. В связи с этим представляется разумным моделировать поведение металлов в рамках теории со стесненным вращением, либо близкой к ней ($N \approx 1$). В таком случае $l_b \approx L_b$.

Для получения количественных оценок L_b (и, с учетом $N \approx 1$ – оценок l_b) необходимо подставить в формулу (2.4.1) значение r_* , каким-либо образом определенное из экспериментов. В частности, в работах [47, 137] было получено, что толщина поверхностного слоя, содержащего практически весь водород, проникающий в материал при искусственном насыщении, составляет не более 60 мкм при радиусе цилиндра $r_0 = 4$ мм. Предполагая, что этот слой характеризуется изменением микроструктуры, примем $r_* = 3.94$ мм. Параметр k в данном случае не имеет физического смысла и может выбираться исключительно исходя из соображений о том, какая величина деформаций считается пренебрежимо малой по сравнению с величиной на границе. Положив $k = 100$, получим $L_b = 13$ мкм; положив $k = 200$, получим $L_b = 11$ мкм. Для этих же образцов в дегазированном состоянии был проведен фрактографический анализ поверхности сечения, согласно которому слой порядка 4 мкм характеризуется наличием большого количества дефектов. Принимая $r_* = 3.996$ мм и предполагая, что деформации в слое практически не меняются ($k = 2$), получим $L_b = 6$ мкм.

Подводя итог, получим значения l_b/N в диапазон от 6 до 13 мкм. Это значение хорошо соотносится с характерным размером зерна (отметим, что в приповерхностной области наблюдается измельчение зерен).

2.5. Численный метод решения краевой задачи в рамках микрополярной теории

Для решения поставленной в разделах 2.1–2.2 задачи будет использоваться метод конечных разностей (МКР) [143]. Ограничимся рассмотрением случая с заданным на боковой поверхности распределенным моментом (граничным условием (2.2.2)). При численном решении понятие континуума заменяется понятием пространственной сетки. Таким образом, область непрерывного изменения аргумента заменяется дискретным множеством точек, а дифференциальные уравнения – разностными.

Введем одномерную разностную сетку $r_i = i\Delta r_i$, где r_i – координаты i -ого узла, $i = 0 \dots I - 1$, см. Рис. 2.1. В случае равномерной сетки $\Delta r_i = r_0 / (I - 1)$. В дальнейшем будет использоваться как равномерная сетка, так и сетка с переменным шагом Δr_i , которая сгущается к внешней границе по правилу геометрической прогрессии. Ячейку (элемент сетки), размещенную между i -ым и $(i + 1)$ -ым узлом будем обозначать как $(i + 1/2)$, ее координату будем определять как $r_{i+1/2} = (r_{i+1} + r_i) / 2$. К каждому внутреннему узлу ($i = 1, \dots, I - 2$) отнесем контрольный объем $V_i = r_i \Delta \varphi \Delta r_{c_i}$, где $\Delta r_{c_i} = r_{i+1/2} - r_{i-1/2}$. К $(I - 1)$ -ому узлу отнесем контрольный объем $V_{I-1} = r_{I-1} \Delta \varphi \Delta r_{c_{I-1}}$, где $\Delta r_{c_{I-1}} = r_{I-1} - r_{I-1-1/2}$, к 0-ому узлу отнесем контрольный объем $V_0 = \Delta \varphi r_{1/2}^2 / 2$.

Исходя из вида балансовых и определяющих соотношений, компоненты перемещений u_z и микроповрота θ_φ представляется естественным задать в узлах сетки (такие переменные будем называть узловыми), а компоненты тензоров силовых и моментных напряжений – в интервалах между узлами, т.е. в ячейках сетки (такие переменные будем называть ячейечными).

В каждой ячейке сетки вводится линейная аппроксимация узловых пере-

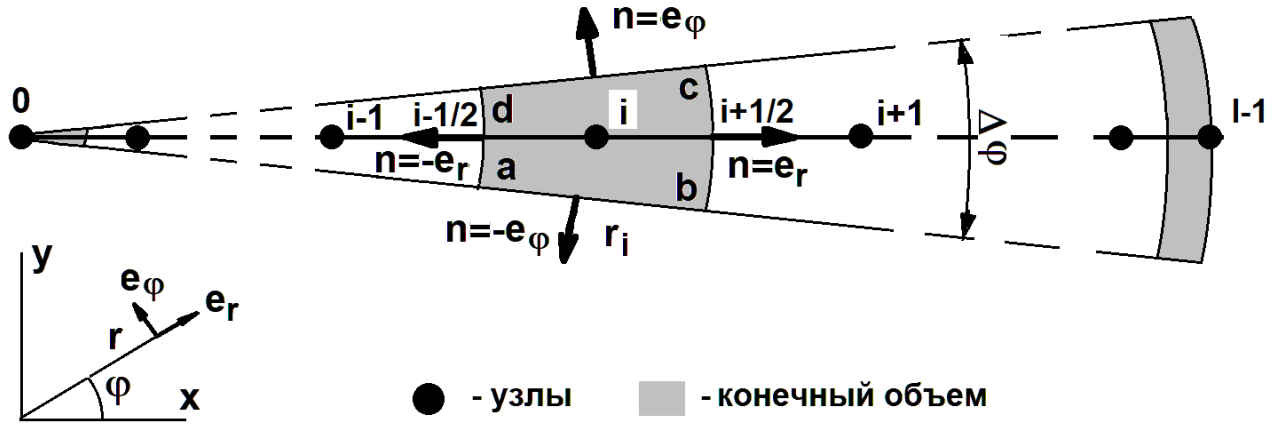


Рис. 2.1. Разностная сетка

менных Φ :

$$\Phi(r) = \frac{\Phi_{i+1} - \Phi_i}{\Delta r_i} r + \frac{\Phi_i r_{i+1} - \Phi_{i+1} r_i}{\Delta r_i}, \quad r_i \leq r \leq r_{i+1}, \quad i = 0 \dots I-2. \quad (2.5.1)$$

Для того, чтобы максимально обеспечить сохранение основных физических величин системы, будем использовать консервативную разностную аппроксимацию дифференциальных уравнений. В предыдущих разделах при переходе от интегральных уравнений (2.1.11)–(2.1.12) к дифференциальным уравнениям в напряжениях (2.2.13) и затем в перемещениях и микроповоротах (2.2.15) мы обеспечили сохранение количества движения. При переходе к дифференциальной форме записи баланса кинетического момента мы, с одной стороны, обеспечили сохранение независимых моментов, с другой стороны, не стали обеспечивать сохранение момента количества движения ради существенного упрощения формулировки задачи: два последних уравнения в системе (2.2.13) получены с учетом баланса количества движения. Иными словами, эти дифференциальные уравнения соответствуют видоизмененному интегральному уравнению

$$\int_S \mathbf{n} \cdot \mathbf{M} dS + \int_V \mathbf{T} \times dV = 0,$$

а не исходному уравнению (2.1.12). В частности, такое упрощение привело к появлению нетипичного для консервативных систем слагаемого ru'_z , для которого предлагается в дальнейшем использовать следующее преобразование:

$$ru'_z = (ru_z)' - u_z.$$

Подчеркнем, что вышеизложенные оговорки имеют значение при разработке численного метода, тогда как при поиске аналитического решения все законы сохранения выполняются точно и система уравнений может быть максимально упрощена, что и было сделано в разделе 2.3.

Перейдем к этапу разностной аппроксимации уравнений. Балансовые соотношения описывают поведение материала не только внутри объема, но и на границах в случае задания на них статических (силовых) граничных условий. При задании в граничных узлах кинематических условий, перемещения и микроповороты в них фиксируются, а балансовые соотношения в этом случае не используются. В рассматриваемой задаче кинематические граничные условия ставятся в центре цилиндра, а статические граничные условия – на боковой поверхности цилиндра (ограничимся рассмотрением неклассического граничного условия (2.2.2)). Для аппроксимации балансов в граничном узле $(I - 1)$ необходимо обратиться к исходным (интегральным) уравнениям.

Аппроксимация баланса количества движения (2.1.11) в узле $(I - 1)$ с учетом статического граничного условия (2.2.3) будет иметь вид:

$$\begin{aligned} \int_{S_{I-1}} \mathbf{n} \cdot \mathbf{T} dS_{I-1} \approx (-\mathbf{e}_r \cdot \mathbf{T}r|_{S_{ad}}) \Delta\varphi + \\ (\mathbf{e}_\varphi \cdot \mathbf{T}|_{S_{dc}} - \mathbf{e}_\varphi \cdot \mathbf{T}|_{S_{ab}}) \Delta r_{c_{I-1}} = 0. \end{aligned} \quad (2.5.2)$$

С учетом баланса количества движения (2.1.11) и статического граничного условия (2.2.2), баланс кинетического момента (2.1.12) будет аппроксими-

роваться следующим образом:

$$\begin{aligned} \int_{S_{I-1}} (\mathbf{n} \cdot \mathbf{M} + \mathbf{r} \times (\mathbf{n} \cdot \mathbf{T})) dS \approx (M_0 \mathbf{e}_\varphi r_{I-1} - \mathbf{e}_r \cdot \mathbf{M} r|_{S_{ad}}) \Delta\varphi + \\ + (\mathbf{e}_\varphi \cdot \mathbf{M}|_{S_{dc}} - \mathbf{e}_\varphi \cdot \mathbf{M}|_{S_{ab}}) \Delta r_{c_{I-1}} + \mathbf{T}_\times|_{I-1} V_{I-1} = 0. \end{aligned} \quad (2.5.3)$$

Поскольку уравнения (2.5.2), (2.5.3) представлены в напряжениях, для однообразия аппроксимируем сначала и во внутренних узлах не окончательные дифференциальные уравнения (2.2.15) в перемещениях, а уравнения (2.2.13) в напряжениях (в дальнейшем убедимся, что окончательная разностная схема действительно аппроксимирует систему (2.2.15)). Получим следующие разностные уравнения, имеющие нетривиальное (ненулевое) решение:

$$\begin{aligned} \frac{T_{rz}r|_{i+\frac{1}{2}} - T_{rz}r|_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta r_{c_i}} = 0, \quad i = 1, \dots, I-2, \\ \frac{M_{r\varphi}r|_{i+\frac{1}{2}} - M_{r\varphi}r|_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta r_{c_i}} + (M_{\varphi r} + T_{zr}r - T_{rz}r)|_i = 0, \quad i = 1, \dots, I-2, \\ \frac{-T_{rz}r|_{I-1-\frac{1}{2}}}{\Delta r_{c_{I-1}}} = 0, \\ \frac{M_0 r_{I-1} - M_{r\varphi}r|_{I-1-\frac{1}{2}}}{\Delta r_{c_{I-1}}} + (M_{\varphi r} + T_{zr}r - T_{rz}r)|_{I-1} = 0, \\ u_z|_0 = 0, \quad \theta_\varphi|_0 = 0. \end{aligned} \quad (2.5.4)$$

Компоненты тензоров силовых и моментных напряжений, которые являются ячейечными величинами, находятся из определяющих соотношений (2.2.11) (2.2.12), в которые входят узловые переменные Φ (u_z и θ_φ) и их производные Φ' (u'_z и θ'_φ). Для решения разностных балансовых соотношений (2.5.4) необходимо определить компоненты тензоров напряжений как в ячейках, так и в узлах. В зависимости от того, где определены компоненты (в ячейке или в узле), используется разная аппроксимация определяющих соотношений. При определении компонент напряжений в ячейках узловые пе-

ременные и их производные, фигурирующие в определяющих соотношениях, аппроксимируются следующим образом:

$$\begin{aligned}\Phi_{i+\frac{1}{2}} &= \frac{\Phi_{i+1} + \Phi_i}{2}, & \Phi'_{i+\frac{1}{2}} &= \frac{\Phi_{i+1} - \Phi_i}{\Delta r_i}; \\ \Phi_{i-\frac{1}{2}} &= \frac{\Phi_i + \Phi_{i-1}}{2}, & \Phi'_{i-\frac{1}{2}} &= \frac{\Phi_i - \Phi_{i-1}}{\Delta r_{i-1}}.\end{aligned}\quad (2.5.5)$$

При определении компонент напряжений в узлах узловые переменные и их производные аппроксимируются как

$$\Phi_i = \Phi_i, \quad \Phi'_i = \frac{1}{\Delta r_{c_i}} \left(\frac{\Phi_{i+1} + \Phi_i}{2} - \frac{\Phi_i + \Phi_{i-1}}{2} \right). \quad (2.5.6)$$

Слагаемые типа $(r\Phi)'|_i$, которые появятся в балансовых соотношениях, будут аппроксимироваться следующим образом:

$$(r\Phi)'|_i = \frac{1}{\Delta r_{c_i}} \left(r_{i+\frac{1}{2}} \frac{\Phi_{i+1} + \Phi_i}{2} - r_{i-\frac{1}{2}} \frac{\Phi_i + \Phi_{i-1}}{2} \right). \quad (2.5.7)$$

Например, величина rT_{rz} с учетом формул (2.5.5)–(2.5.7) аппроксимируется в ячейке $(i + 1/2)$ следующим образом:

$$rT_{rz}|_{i+\frac{1}{2}} = r_{i+\frac{1}{2}} \frac{\mu}{1 - N^2} \left(\frac{u_{z_{i+1}} - u_{z_i}}{\Delta r_i} + 2N^2 \frac{\theta_{\varphi_{i+1}} + \theta_{\varphi_i}}{2} \right),$$

тогда как ее аппроксимация в узле i имеет вид:

$$rT_{rz}|_i = \frac{\mu}{1 - N^2} \left[\frac{1}{\Delta r_{c_i}} \left(r_{i+\frac{1}{2}} \frac{u_{z_{i+1}} + u_{z_i}}{2} - r_{i-\frac{1}{2}} \frac{u_{z_i} + u_{z_{i-1}}}{2} \right) - u_{z_i} + 2N^2 r_i \theta_{\varphi_i} \right].$$

В результате получим окончательно следующую разностную схему для определения аксиальных перемещений u_{z_i} и компоненты микроповорота θ_{φ_i} ,

соответственно:

$$\begin{aligned}
& \frac{\mu}{1-N^2} \frac{1}{\Delta r_{c_i}} \left[\frac{r_{i+\frac{1}{2}}}{\Delta r_i} (u_{z_{i+1}} - u_{z_i}) - \frac{r_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta r_{i-1}} (u_{z_i} - u_{z_{i-1}}) \right] + \\
& + \frac{2N^2\mu}{1-N^2} \frac{1}{\Delta r_{c_i}} \left[\frac{r_{i+\frac{1}{2}}}{2} (\theta_{\varphi_{i+1}} + \theta_{\varphi_i}) - \frac{r_{i-\frac{1}{2}}}{2} (\theta_{\varphi_i} + \theta_{\varphi_{i-1}}) \right] = 0, \quad i = 1, \dots, I-2, \\
& - \frac{\mu}{1-N^2} \frac{1}{\Delta r_{c_{I-1}}} \frac{r_{I-1-\frac{1}{2}}}{\Delta r_{I-1}} (u_{z_{I-1}} - u_{z_{I-2}}) - \\
& - \frac{2N^2\mu}{1-N^2} \frac{1}{\Delta r_{c_{I-1}}} \frac{r_{I-1-\frac{1}{2}}}{2} (\theta_{\varphi_{I-1}} + \theta_{\varphi_{I-2}}) = 0, \\
& u_{z_0} = 0;
\end{aligned} \tag{2.5.8}$$

$$\begin{aligned}
& 4\mu l_b^2 \frac{1}{\Delta r_{c_i}} \left[\frac{r_{i+\frac{1}{2}}}{\Delta r_i} (\theta_{\varphi_{i+1}} - \theta_{\varphi_i}) - \frac{r_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta r_{i-1}} (\theta_{\varphi_i} - \theta_{\varphi_{i-1}}) \right] - \left(4\mu l_b^2 \frac{1}{r_i} + \frac{4\mu N^2}{1-N^2} r_i \right) \theta_{\varphi_i} - \\
& - \frac{2\mu N^2}{1-N^2} \frac{1}{\Delta r_{c_i}} \left(r_{i+\frac{1}{2}} \frac{u_{z_{i+1}} + u_{z_i}}{2} - r_{i-\frac{1}{2}} \frac{u_{z_i} + u_{z_{i-1}}}{2} \right) + \\
& + \frac{2\mu N^2}{1-N^2} u_{z_i} = 0, \quad i = 1 \dots I-2, \\
& \frac{1}{\Delta r_{c_{I-1}}} \left[r_{I-1} M_0 - 4\mu l_b^2 \frac{r_{I-1-\frac{1}{2}}}{\Delta r_{I-2}} (\theta_{\varphi_{I-1}} - \theta_{\varphi_{I-2}}) \right] + \\
& + \frac{2\mu (l_t^2 - 2l_b^2)}{\Delta r_{c_{I-1}}} \theta_{\varphi_{I-1}} - \left(4\mu l_b^2 \frac{1}{r_{I-1}} + \frac{4\mu N^2}{1-N^2} r_{I-1} \right) \theta_{\varphi_{I-1}} - \\
& - \frac{2\mu N^2}{1-N^2} \frac{1}{\Delta r_{c_{I-1}}} r_{I-1} u_{z_{I-1}} + \frac{2\mu N^2}{1-N^2} u_{z_{I-1}} = 0, \\
& \theta_{\varphi_0} = 0.
\end{aligned} \tag{2.5.9}$$

Видно, что разностные уравнения во внутренних узлах $i = (1, \dots, I-2)$ аппроксимируют представленную в разделе 2.2 систему дифференциальных уравнений в перемещениях (2.2.15) и, вообще говоря, могли бы быть получены “напрямую” (без предварительной аппроксимации балансовых и определяющих соотношений).

Для решения системы (2.5.8)–(2.5.9) применяется метод матричной прогонки [143].

2.6. Напряженно-деформированное состояние поверхностного слоя

Напряженно-деформированное состояние определялось для стандартного цилиндрического образца радиусом $r_0 = 4$ мм и длиной $L = 40$ мм, используемого в тестах по искусственному насыщению водородом. В [47, 137] поверхностный эффект при наводороживании был обнаружен для образцов, выполненных из атмосферостойкой стали 14ХГНДЦ, точные значения классических упругих модулей которой не приведены в справочниках. Для получения количественного решения использовались значения материальных параметров похожих сталей: модуль сдвига $\mu = 80$ ГПа и коэффициент Пуассона $\nu = 0.3$. Остальные модули упругости изотропного материала определялись через μ и ν . Неклассические модули были оценены в разделе 2.4: $L_b = l_b/N \in [6, 13]$ мкм.

Поскольку характер убывания идентичен для практически всех компонент деформаций и напряжений, а также перемещений и микроповоротов, ограничимся анализом зависимости аксиальных перемещений.

Ввиду идентичности решений, получаемых при задании статического и кинематического граничных условий на боковой поверхности цилиндра, ограничимся рассмотрением распределенного момента (2.2.2). Ввиду отсутствия каких-либо экспериментальных данных о значении распределенного момента на боковой поверхности образцов, проанализируем влияние этого значения в диапазоне от -50 до -150 кПа·м, поскольку величина перемещений в этом случае не превышает размер структурной неоднородности, а развороты частиц среды составляют не более нескольких градусов. Влияние значения распределенного момента на боковой поверхности продемонстрировано на Рис. 2.2, на котором показана зависимость аналитического решения для аксиальных перемещений от радиальной координаты при $N = 1$, $l_b = 6$ мкм. Видно, что

значение M_0 влияет на абсолютную величину перемещений, но не оказывает существенного влияния на размеры области затухания решения.

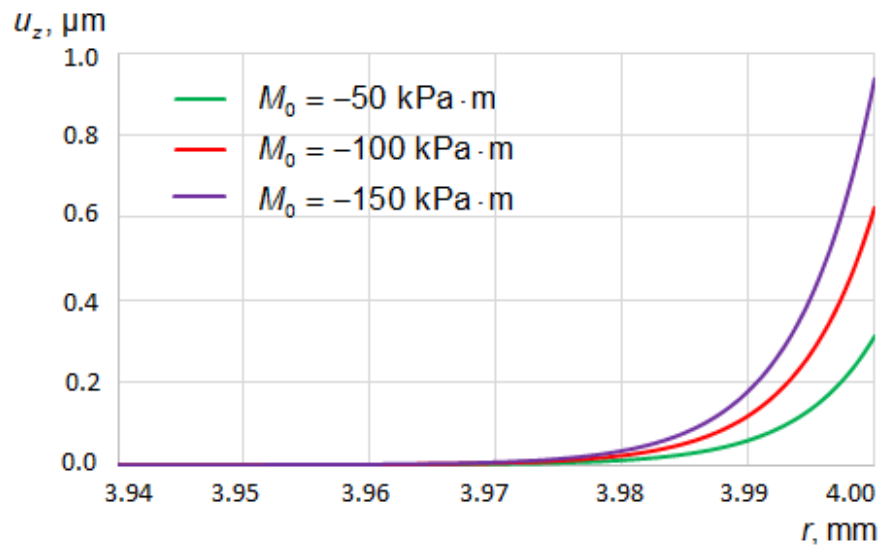


Рис. 2.2. Зависимость аксиальных перемещений от радиальной координаты при разных значениях распределенного момента на боковой поверхности

На Рис. 2.3 показана зависимость аналитического решения для аксиальных перемещений от радиальной координаты при разных значениях характерной длины для деформации изгиба (при $N = 1$, т.е. $l_b = L_b$), $M_0 = -100$ кПа·м. Видно, что дополнительные перемещения, вызванные наличием на боковой поверхности распределенного момента, возникают в поверхностном слое толщиной порядка 20–60 мкм, что соответствует экспериментальным данным о толщине насыщенного поверхностного слоя (стоит отметить, что, разумеется, малость перемещений не должна обязательно приводить к видимым изменениям микроструктуры). Увеличение характерной длины для деформации изгиба приводит к увеличению толщины поверхностного слоя.

Численное решение задачи было получено на основании разработанного в разделе 2.5 численного метода. Сложность системы не допускает строгого доказательства ее сходимости. В связи с этим сходимость достигалась путем проведения расчетов на серии измельчаемых сеток. На Рис. 2.4 приведено сравнение приближенного аналитического решения типа пограничного слоя

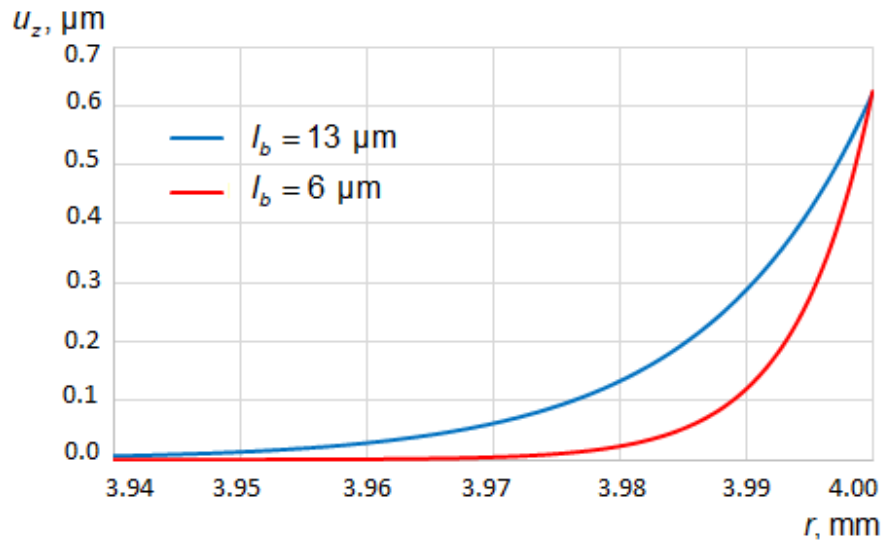


Рис. 2.3. Зависимость аксиальных перемещений от радиальной координаты при разных значениях характерной длины для деформации изгиба

и численного при значениях $M_0 = -100 \text{ кПа} \cdot \text{м}$, $N = 0.99$, $l_b = 6 \text{ мкм}$ и $l_b = 13 \text{ мкм}$. Численные результаты получены при использовании двух сеток ($I = 10000$ и $I = 5000$), построенных на всем радиусе, и при рассмотрении только поверхностного слоя (задача решалась на промежутке $3.9 \leq r \leq 4.0$, $I = 1000$). Погрешность аналитического решения в сравнении с численным, полученным с учетом всех производных в дифференциальных уравнениях, составила не более 2%. При этом видно, что задачу можно решать не на всем числовом промежутке, а ограничиться рассмотрением приповерхностной области.

2.7. Локализованная пластическая деформация

Поскольку полученное в предыдущих разделах напряженно-деформированное состояние поверхностного слоя цилиндрического образца существенно отличается от напряженно-деформированного состояния основного объема материала, вблизи поверхности может возникнуть локализованная пластическая деформация, в то время как на макроуровне материал будет вести себя

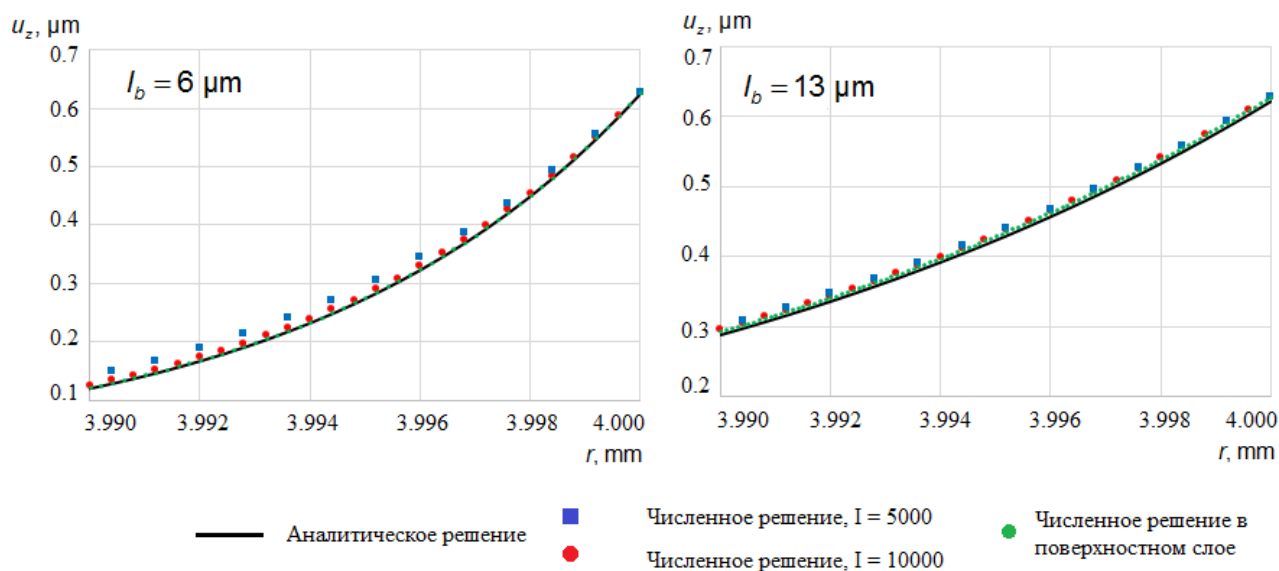


Рис. 2.4. Сравнение аналитического и численного решения

упруго. Оценим возможность инициации локализованной пластической деформации. При этом рассмотрим дополнительно упругое растяжение цилиндрического образца при заданном на боковой поверхности распределенном моменте. Для такого нагружения будет показано, что несмотря на то, что растяжение не приводит к пластической деформации, наличие на поверхности момента будет ее инициировать.

Результаты раздела 2.7 опубликованы в работе [16].

2.7.1. Критерии пластичности для микрополярных сред

Условие пластичности изотропного материала не должно зависеть от выбора направления и может быть представлено функцией главных инвариантов тензора напряжений. Всестороннее сжатие, как правило, не инициирует пластические деформации, и условие пластичности зависит от инвариантов девиатора тензора напряжений [24, 28]. В классической теории сплошных сред чаще всего используются критерии Треска и Мизеса. Критерий Мизеса обобщается для случая микрополярных сред введением либо единого критерия пластичности, зависящего одновременно от силовых и моментных напряже-

ний, либо двух независимых критериев для силовых и моментных напряжений соответственно [23, 70].

Единый критерий пластичности имеет следующий общий вид [23, 70]:

$$Y(\mathbf{T}, \mathbf{M}) \equiv \tilde{J}_2(\mathbf{T}, \mathbf{M}) - Y_p = 0, \quad (2.7.1)$$

$$\tilde{J}_2(\mathbf{T}, \mathbf{M}) = \sqrt{a_1 \mathbf{S} : \mathbf{S} + a_2 \mathbf{S} \cdot \cdot \mathbf{S} + b_1 \mathbf{M} : \mathbf{M} + b_2 \mathbf{M} \cdot \cdot \mathbf{M}}, \quad (2.7.2)$$

где $\mathbf{S} = \mathbf{T} - 1/3 (\text{tr} \mathbf{T}) \mathbf{I}$ – девиатор тензора силовых напряжений, a_1, a_2, b_1, b_2 – материальные параметры, Y_p – предел текучести.

При использовании двух независимых критериев пластичности для силовых и моментных напряжений вводятся соответственно пределы текучести Y_p^T и Y_p^M . Функции текучести и интенсивности напряжений определяются следующим образом [23, 70]:

$$Y_\sigma(\mathbf{T}) \equiv \tilde{J}_2(\mathbf{T}) - Y_p^T = 0, \quad Y_M(\mathbf{M}) \equiv \tilde{J}_2(\mathbf{M}) - Y_p^M = 0, \quad (2.7.3)$$

$$\tilde{J}_2(\mathbf{T}) = \sqrt{a_1 \mathbf{S} : \mathbf{S} + a_2 \mathbf{S} \cdot \cdot \mathbf{S}}, \quad \tilde{J}_2(\mathbf{M}) = \sqrt{b_1 \mathbf{M} : \mathbf{M} + b_2 \mathbf{M} \cdot \cdot \mathbf{M}}. \quad (2.7.4)$$

Материальные параметры a_1, a_2, b_1, b_2 могут задаваться различными способами [23, 55, 70]. При предельном переходе от микрополярного континуума к безмоментной среде, т.е. при выполнении условий $\mathbf{M} = 0$, $\mathbf{T} = \mathbf{T}^T$, критерии пластичности должны совпадать с классическим. Переход к предельному случаю накладывает ограничение на комбинацию материальных параметров: $a_1 + a_2 = 1/2$. Рассмотрим далее некоторые наиболее широко используемые наборы материальных параметров.

Авторы [54, 55, 131, 142, 165] вводят единый критерий текучести (2.7.1), в котором полагают $b_2 = 0$. При этом оставшиеся параметры разными авторами задаются по-разному. Набор параметров $a_1 = a_2 = 1/4$, $b_1 = 1/(2l_c^2)$, где l_c – определяющий размер области локализации концентрации напряжений параметр материала размерности длины, называется “стандартным” [54, 70, 158].

Таблица 2.1. Наборы параметров материала в выражении для интенсивности напряжений

№ набора	Значения параметров
1	$a_1 = a_2 = \frac{1}{4}, b_1 = \frac{1}{2l_b^2}, b_2 = 0$
2	$a_1 = \frac{3}{4}, a_2 = -\frac{1}{4}, b_1 = \frac{1}{8l_b^2}, b_2 = 0$
3	$a_1 = \frac{1}{2}, a_2 = 0, b_1 = \frac{1}{2l_b^2}, b_2 = 0$
4	$a_1 = a_2 = \frac{1}{4}, b_1 = b_2 = \frac{1}{2l_b^2}$
5	$a_1 = a_2 = \frac{1}{4}, b_1 = b_2 = \frac{1}{4l_b^2}$

В работах [131, 165] при построении статической модели используются значения параметров $a_1 = 3/4$, $a_2 = -1/4$, $b_1 = 1/(8l_c^2)$. Авторы [46, 111] вводят интенсивность несколько отличным от (2.7.2) способом:

$$\tilde{J}_2(\mathbf{T}, \mathbf{M}) = \sqrt{\frac{1}{2} \mathbf{S} : \mathbf{S} + \frac{1}{2} (\beta^2 - 1) \mathbf{T}^A : \mathbf{T}^A + b_1 \mathbf{M} : \mathbf{M}}. \quad (2.7.5)$$

Автор [111], помимо этого, рассматривает также два независимых критерия пластичности и вводит следующие несколько отличные от (2.7.4) выражения для интенсивностей:

$$\tilde{J}_2(\mathbf{T}) = \sqrt{\frac{1}{2} \mathbf{S} : \mathbf{S} + \frac{1}{2} (\beta^2 - 1) \mathbf{T}^A : \mathbf{T}^A}, \quad \tilde{J}_2(\mathbf{M}) = \sqrt{b_1 \mathbf{M} : \mathbf{M}}, \quad (2.7.6)$$

где $b_1 = (\alpha_c/l_c)^2$, $\alpha_c, \beta_c \geq 0$ – безразмерные материальные параметры.

Определим интенсивность напряжений по общим формулам (2.7.2) и (2.7.4) при наборах параметров, указанных в Таблице 2.1. В качестве масштабного параметра l_c рассмотрим характерную длину для деформации изгиба l_b [142].

Учтем, что при растяжении образца вводится интенсивность $J_2 = \sqrt{3} \tilde{J}_2$.

2.7.2. Оценка области локализации пластической деформации

Решение задачи о растяжении цилиндрического образца с заданным на боковой поверхности распределенным моментом можно представить, используя принцип суперпозиции линейной теории упругости, как сумму решения задачи о растяжении цилиндра при свободной от моментной нагрузки боковой поверхности и задачи при заданном на боковой поверхности распределенном моменте при свободных торцах. Ограничимся случаем среды со стесненным вращением. Тогда, с учетом решения (2.3.20) получим следующие выражения для тензоров силовых и моментных напряжений:

$$\begin{aligned} \mathbf{T} &= \frac{F}{S} \mathbf{e}_z \mathbf{e}_z - \frac{M_0}{l_b} e^{-\frac{r_0-r}{l_b}} \mathbf{e}_z \mathbf{e}_r, \\ \mathbf{M} &\approx M_0 e^{-\frac{r_0-r}{l_b}} \left[\frac{l_t^2 - 2l_b^2}{2l_b^2} \mathbf{e}_\varphi \mathbf{e}_r + \mathbf{e}_r \mathbf{e}_\varphi \right], \end{aligned} \quad (2.7.7)$$

где F – растягивающая сила, приложенная к торцам цилиндра, $S = \pi r_0^2$ – площадь поперечного сечения цилиндра.

Выпишем все двойные скалярные произведения, фигурирующие в выражениях (2.7.2), (2.7.4) для интенсивности напряжений:

$$\begin{aligned} \mathbf{S} \cdot \cdot \mathbf{S} &= \frac{2}{3} \frac{F^2}{S^2}, \\ \mathbf{S} : \mathbf{S} &\approx \frac{2}{3} \frac{F^2}{S^2} + \frac{M_0^2}{l_b^2} e^{-2\frac{(r_0-r)}{l_b}}, \\ \mathbf{M} \cdot \cdot \mathbf{M} &\approx \frac{l_t^2 - 2l_b^2}{l_b^2} M_0^2 e^{-2\frac{(r_0-r)}{l_b}}, \\ \mathbf{M} : \mathbf{M} &\approx \frac{(l_t^2 - 2l_b^2)^2 + 4l_b^4}{4l_b^4} M_0^2 e^{-2\frac{(r_0-r)}{l_b}}. \end{aligned}$$

Видно, что $\mathbf{M} \cdot \cdot \mathbf{M}$ и $\mathbf{M} : \mathbf{M}$ зависят от значений двух характерных длин. Увеличение характерной длины для деформации кручения l_t увели-

чивает значения свертки; $\mathbf{M} : \mathbf{M}$ принимает отрицательные значения при $0 \leq l_t < \sqrt{2}l_b$, и $\mathbf{M} : \mathbf{M} = 0$ при $l_t = \sqrt{2}l_b$. При этом характерная длина для деформации кручения l_t ($0 \leq l_t \leq 2l_b$) будет влиять только на абсолютное значение интенсивности напряжений, но не на размер области ее убывания, который определяется показателем экспоненты, в котором присутствует только параметр l_b .

При решении задачи в рамках классической теории интенсивность напряжений при растяжении будет определяться следующим образом: $J_2^{cl} = \sqrt{F^2/S^2}$.

Примем, что растягивающее усилие $F = 10$ кН. Тогда интенсивность напряжений окажется равной $J_2^{cl} = 199$ МПа, что не превышает значения предела текучести при растяжении, который примем равным 350 МПа. Таким образом, при моделировании поведения материала в рамках классической теории оно является чисто упругим. Зададим распределенный момент на боковой поверхности $M_0 = -100$ кПа·м.

Приведем выражения для интенсивности напряжений, обобщенные на случай микрополярной среды формулой (2.7.2). Рассмотрим сначала наборы параметров №1–№3 из Таблицы 2.1, в которых $b_2 = 0$ и, следовательно, свертка $\mathbf{M} \cdot \cdot \mathbf{M}$ не играет роли. При использовании стандартного набора параметров (№1 из Таблицы 2.1) выражение для интенсивности имеет следующий вид:

$$J_{2_1} = \sqrt{\frac{F^2}{S^2} + \frac{3}{8} \frac{M_0^2}{l_b^6} \left((l_t^2 - 2l_b^2)^2 + 6l_b^4 \right) e^{-2\frac{(r_0-r)}{l_b}}}. \quad (2.7.8)$$

При использовании набора параметров №2 из Таблицы 2.1 интенсивность напряжений оказывается равной

$$J_{2_2} = \sqrt{\frac{F^2}{S^2} + \frac{3}{32} \frac{M_0^2}{l_b^6} \left((l_t^2 - 2l_b^2)^2 + 28l_b^4 \right) e^{-2\frac{(r_0-r)}{l_b}}}. \quad (2.7.9)$$

При использовании набора параметров №3 из Таблицы 2.1 интенсивность определяется выражением

$$J_{2_3} = \sqrt{\frac{F^2}{S^2} + \frac{3M_0^2}{8l_b^6} \left((l_t^2 - 2l_b^2)^2 + 8l_b^4 \right)} e^{-2\frac{(r_0-r)}{l_b}}. \quad (2.7.10)$$

При сравнении выражений (2.7.8)–(2.7.10) видно, что имеют место следующие равенства: $J_{2_1}|_{l_t=0} = J_{2_1}|_{l_t=2l_b}$, $J_{2_2}|_{l_t=0} = J_{2_2}|_{l_t=2l_b}$, $J_{2_3}|_{l_t=0} = J_{2_3}|_{l_t=2l_b}$.

Рассмотрим теперь наборы параметров №4 и №5 из Таблицы 2.1. Отметим, что при $l_t = \sqrt{2}l_b$ свертка $\mathbf{M} \cdot \mathbf{M} = 0$ и не играет роли, и использование набора №4 тождественно использованию набора №1. При $l_t = 2l_b$ тождественным является использование наборов №5 и №1. В общем случае использование набора №4 приводит к

$$J_{2_4} = \sqrt{\frac{F^2}{S^2} + \frac{3M_0^2}{16l_b^6} (l_t^4 + 4l_b^4)} e^{-2\frac{(r_0-r)}{l_b}}, \quad (2.7.11)$$

а использование набора №5 дает

$$J_{2_5} = \sqrt{\frac{F^2}{S^2} + \frac{3M_0^2}{8l_b^6} (l_t^4 + 2l_b^4)} e^{-2\frac{(r_0-r)}{l_b}}. \quad (2.7.12)$$

При сравнении выражений (2.7.11) и (2.7.12) видно, что при $l_t = 0$ значения интенсивностей совпадают.

На Рис. 2.5 представлено сравнение зависимостей интенсивностей напряжений, посчитанных по формулам (2.7.8)–(2.7.12), от радиальной координаты при максимальном значении характерной длины для деформации кручения $l_t = 2l_b$ (в этом случае наборы параметров №1 и №5 эквивалентны) и при двух значениях характерной длины для деформации изгиба $l_b = 6$ мкм и $l_b = 13$ мкм. Заметим, что качественно результаты, полученные для разных наборов параметров в выражении для интенсивности, не отличаются друг друга. Учет свертки $\mathbf{M} \cdot \mathbf{M}$ также не оказывает качественного влияния на результат.

Основное различие заключается в количественных значениях интенсивности в области концентрации напряжений. Различие максимально непосредственно на боковой поверхности цилиндра. При этом видно, что все полученные значения существенно превышают предел текучести материала при растяжении. Важно, что ширина зоны области, интенсивность напряжений в которой превышает предел текучести, не зависит от выбора конкретного набора параметров, но зависит от значения l_b : при $l_b = 13$ мкм (Рис. 2.5, слева) ширина области около 40 мкм, в то время как при $l_b = 6$ мкм (Рис. 2.5, справа) ширина области около 20 мкм. Т.е. уменьшение характерной длины для деформации изгиба уменьшает ширину области. При этом значения интенсивности увеличиваются при уменьшении характерной длины.

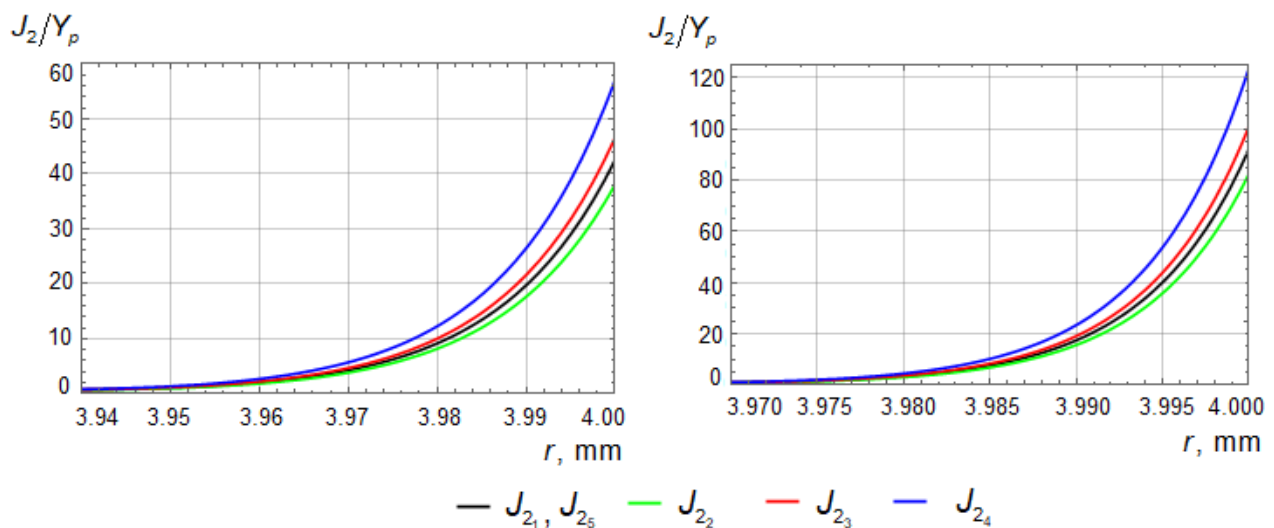


Рис. 2.5. Сравнение интенсивностей напряжений, полученных для разных наборов параметров (№1–5 из Таблицы 2.1) при $l_b = 13$ мкм (слева) и $l_b = 6$ мкм (справа)

Приведем теперь выражения для интенсивности напряжений, обобщенные на случай микрополярной среды формулами (2.7.4). Использование наборов параметров №1–№5 из Таблицы 2.1 даст соответственно следующие выраже-

ния для интенсивностей силовых и моментных напряжений:

$$J_{2_1}(\mathbf{T}) = \sqrt{\frac{F^2}{S^2} + \frac{3}{4} \frac{M_0^2}{l_b^2} e^{-2\frac{(r_0-r)}{l_b}}}, \quad (2.7.13)$$

$$J_{2_1}(\mathbf{M}) = \sqrt{\frac{3M_0^2}{8l_b^6} \left((l_t^2 - 2l_b^2)^2 + 4l_b^4 \right) e^{-2\frac{(r_0-r)}{l_b}}},$$

$$J_{2_2}(\mathbf{T}) = \sqrt{\frac{F^2}{S^2} + \frac{9}{4} \frac{M_0^2}{l_b^2} e^{-2\frac{(r_0-r)}{l_b}}}, \quad (2.7.14)$$

$$J_{2_2}(\mathbf{M}) = \sqrt{\frac{3M_0^2}{32l_b^6} \left((l_t^2 - 2l_b^2)^2 + 4l_b^4 \right) e^{-2\frac{(r_0-r)}{l_b}}},$$

$$J_{2_3}(\mathbf{T}) = \sqrt{\frac{F^2}{S^2} + \frac{3}{2} \frac{M_0^2}{l_b^2} e^{-2\frac{(r_0-r)}{l_b}}}, \quad (2.7.15)$$

$$J_{2_3}(\mathbf{M}) = \sqrt{\frac{3M_0^2}{8l_b^6} \left((l_t^2 - 2l_b^2)^2 + 4l_b^4 \right) e^{-2\frac{(r_0-r)}{l_b}}},$$

$$J_{2_4}(\mathbf{T}) = \sqrt{\frac{F^2}{S^2} + \frac{3}{4} \frac{M_0^2}{l_b^2} e^{-2\frac{(r_0-r)}{l_b}}}, \quad J_{2_5}(\mathbf{M}) = \frac{\sqrt{3}M_0 l_t^2}{4l_b^3} e^{-\frac{(r_0-r)}{l_b}}, \quad (2.7.16)$$

$$J_{2_5}(\mathbf{T}) = \sqrt{\frac{F^2}{S^2} + \frac{3}{4} \frac{M_0^2}{l_b^2} e^{-2\frac{(r_0-r)}{l_b}}}, \quad J_{2_4}(\mathbf{M}) = \frac{\sqrt{3}M_0 l_t^2}{2\sqrt{2}l_b^3} e^{-\frac{(r_0-r)}{l_b}}. \quad (2.7.17)$$

При сравнении выражений (2.7.13)–(2.7.17) отметим, что при использовании определенных наборов параметров могут совпадать интенсивности силовых ((2.7.13), (2.7.16) и (2.7.17)) или интенсивности моментных напряжений ((2.7.13) и (2.7.15)). Сравнение данных интенсивностей с соответствующими интенсивностями, полученными при использовании единого условия пластич-

ности, представлены на Рис. 2.6 ($l_b = 13$ мкм). Видно, что критерии дают разные абсолютные значения интенсивности напряжений вблизи поверхности, но при этом ширина области, интенсивность напряжений в которой превышает предел текучести, одинакова по всем случаям.

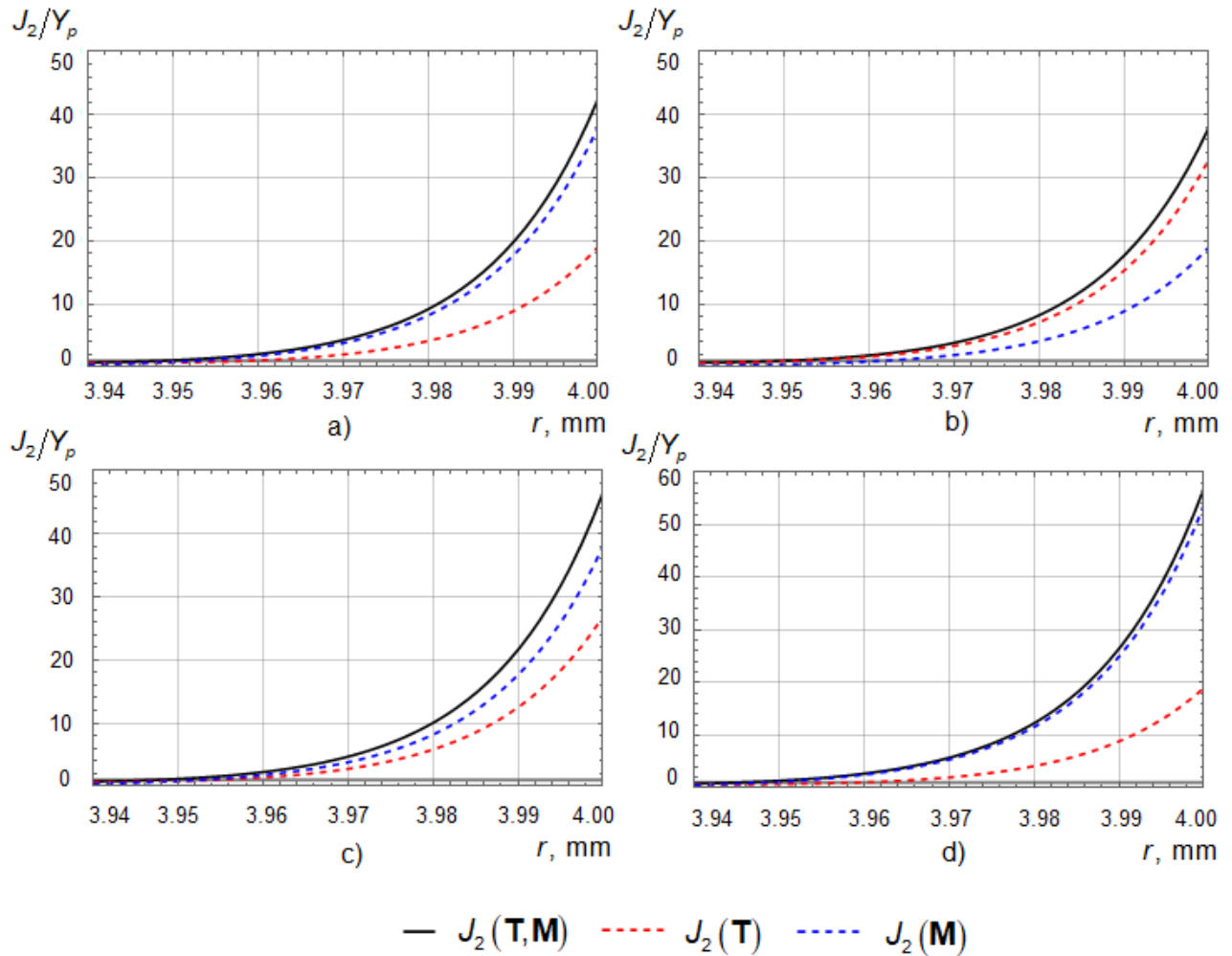


Рис. 2.6. Сравнение интенсивностей напряжений, вычисленных для одного и для двух критериев пластичности: (а) – набор параметров №1 и №5, (б) – набор параметров №2, (с) – набор параметров №3, (д) – набор параметров №4; $l_b = 13$ мкм

Таким образом, для оценки ширины области, интенсивность напряжений в которой превышает предел текучести, могут быть использованы любые критерии пластичности, обобщенные на микрополярные среды – как единый, так и независимые, а также любой набор параметров. При этом учет моментных взаимодействий между частицами среды приводит к существенному увели-

чению интенсивности в поверхностном слое, значение интенсивности значительно превышает предел текучести. В результате, при общем упругом поведении материала может наблюдаться локализованная пластическая деформация в приповерхностной области, размеры которой сопоставимы с характерным размером структурной неоднородности материала (размером зерна).

2.8. Основные результаты

- Разработан численный метод для решения задачи об определении напряженно-деформированного состояния длинного цилиндра в рамках микрополярной теории упругости при задании неклассического граничного условия на боковой поверхности.
- Получено приближенное аналитическое решение задачи об определении напряженно-деформированного состояния длинного цилиндра в рамках микрополярной теории упругости при задании на боковой поверхности неклассического граничного условия.
- Определено существенно неоднородное напряженно-деформированное состояние цилиндрического образца при учете моментных взаимодействий между частицами упругой среды, что позволяет описывать связанные с особенностями микроструктуры поверхностные эффекты различной природы.
- Предложен способ определения отношения характерной длины для деформации изгиба к параметру асимметрии, основанный на сравнении результатов моделирования в рамках микрополярной теории упругости и экспериментальных данных о микроструктуре поверхностного слоя.
- На примере частной краевой задачи об определении напряженно-деформированного состояния длинного цилиндра в рамках микрополярной тео-

рии показано, что вблизи поверхности может наблюдаться локализованная пластическая деформация. Размер области не зависит от выбора критерия пластичности и определяется характерной длиной для деформации изгиба.

Глава 3

Моделирование процесса диффузии в деформируемом твердом теле с учетом влияния неоднородной микроструктуры

Концентрация диффундирующего вещества в материале определяется из баланса массы, являющегося фундаментальным законом. Возможность непосредственного учета микроструктуры в балансовом соотношении сводится к возможности введения стоковых (или истоковых) членов, моделирующих, например, ловушки для примеси. Зависимость процесса диффузии от прочих характеристик микроструктуры материала может быть учтена в определяющем соотношении для диффузионного потока, которое, в свою очередь, может вводиться различным образом. Согласно классическому закону Фика, поток пропорционален градиенту концентрации. Закон Фика может быть обобщен для учета влияния напряженно-деформированного состояния материала. Такое влияние учитывается либо за счет введения дополнительной термодинамической силы [53, 58, 102, 108, 146, 154, 170], либо за счет рассмотрения зависимости коэффициента диффузии от напряжений/деформаций [15, 85, 161] или от локальной энергии [78, 81, 122, 159], которая может коррелировать с энергией активации реакции, фигурирующей в законе Аррениуса [39]. Чаще всего в роли дополнительной термодинамической силы выступает градиент давления – такие модели описывают явление бародиффузии [95, 146]. Более общий подход основывается на учете градиента химического потенциа-

ла [53, 103, 170]. J.C.M. Li, F.C. Larche и J.L. Cahn [102, 104, 108], учли влияние гидростатического напряжения, вызванного накоплением диффундирующего вещества, введя его через химический потенциал системы. Согласно [104], химический потенциал деформируемого твердого тела пропорционален тензору энергии-импульса Эшелби [68]. Задача диффузии с учетом химического потенциала подробно исследовалась в работах [53, 170]. С.Н. Wu [170] показал, что химический потенциал изотропного материала пропорционален следу тензора энергии-импульса Эшелби.

При учете микроструктуры через эффективные характеристики гетерогенного материала они могут быть введены в определяющие соотношения для потока и напряжений. При этом при рассмотрении классического закона Фика может быть учтен только эффективный коэффициент диффузии, в то время как рассмотрение более общих соотношений для потока позволяет также учесть эффективные упругие модули. При учете структурных особенностей за счет введения в модель дополнительных степеней свободы влияние характеристик микроструктуры на процесс диффузии может быть учтено только при рассмотрении определяющих соотношений для потока, зависящих, помимо градиента концентрации, от градиентов других полей.

Глава посвящена моделированию процесса диффузии в деформируемом твердом теле с учетом влияния характеристик микроструктуры, определенных в первых двух главах. В частности, при построении концентрационных профилей рассматриваются эффективные свойства материала с микротрещинами, определенные в главе 1. Учитывается, что микротрещины распределены в материале неравномерно. Для описания поверхностного эффекта при диффузии учитывается влияние найденного в главе 2 напряженно-деформированного состояния на распределение примеси. Для описания конкретных эффектов при диффузии в материале со сложной микроструктурой в главе будут использоваться различные известные из литературы определя-

ющие соотношения для потока.

Зачастую опасность представляет именно локальное увеличение концентрации вредной примеси. Такое увеличение может привести к сокращению сроков служб готовой продукции и преждевременному выводу ее из эксплуатации, тогда как равномерное распределение той же суммарной концентрации диффундирующего вещества не оказывает заметного влияния на свойства материала и его поведение. В связи с этим, основной акцент в главе будет сделан на оценку локального увеличения концентрации, которое возникает до установления стационарного режима.

Результаты главы 3 опубликованы в работах [2, 7, 8, 38, 75, 139].

3.1. Моделирование процесса диффузии в пористом материале

Раздел посвящен моделированию диффузии с учетом влияния микроструктуры пористого материала посредством рассмотрения определенных в главе 1 эффективных свойств. Описывается два различных процесса:

- Диффузионный процесс в материале, содержащем неравномерно распределенные сфероидальные поры. Исследуется влияние сферических, сплюснутых и вытянутых сфероидальных пор. Учитываются различные варианты распределения неоднородностей по ориентациям: произвольное распределение по ориентациям, преимущественное направление неоднородностей, произвольное распределение осей симметрии сфероидов в одной плоскости.
- Диффузионный процесс, учитывающий порообразование при массопереносе. Исследуется влияние сплюснутых сфероидальных пор, моделирующих межзеренные трещины. Ввиду отсутствия внешней нагрузки предполагается произвольное распределение неоднородностей по ориентациям.

Описанная неоднородная микроструктура характерна, в частности, для алюминия при наличии в нем водородных блистеров [57, 59].

3.1.1. Задачи диффузии и массопругости в рамках классической теории

Промоделируем процесс диффузии газа в твердом теле. В отсутствие стоков/источников, концентрация диффундирующего вещества определяется балансом массы

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V c dV = \int_S \mathbf{n} \cdot \mathbf{J} dS, \quad (3.1.1)$$

где c – концентрация, $\mathbf{n}$ – вектор нормали, $\mathbf{J}$ – диффузионный поток.

Баланс массы в локальной форме имеет следующий вид:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{J}, \quad (3.1.2)$$

где ∇ – набла-оператор.

Обычно предполагается, что накопление диффундирующего вещества приводит только к дилатационному расширению материала и к появлению давления. Для учета дополнительного потока, инициированного градиентом давления ∇P , используем следующее определяющее соотношение [95, 146]:

$$\mathbf{J} = -D (\nabla c + \bar{\beta} c \nabla P), \quad (3.1.3)$$

где D – коэффициент диффузии, $\bar{\beta}$ – коэффициент Онзагера.

При отсутствии дополнительного потока, вызванного градиентом давления, общий поток пропорционален градиенту концентрации и определяется классическим законом Фика:

$$\mathbf{J} = -D \nabla c. \quad (3.1.4)$$

Представим определяющее соотношение для потока в общем виде как

$$\mathbf{J} = -D (\nabla c + \bar{\beta} c \mathbf{F}), \quad (3.1.5)$$

где вектор $\mathbf{F}$ играет роль обобщенной термодинамической силы ($\mathbf{F} = \nabla P$ при учете бародиффузии и $\mathbf{F} = 0$ при рассмотрении классического закона Фика).

Для нахождения дополнительного потока определим напряженно-деформированное состояние матрицы. Поведение материала определяется балансом количества движения, который в отсутствие массовых сил имеет вид

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \mathbf{v} dV = \int_S \mathbf{n} \cdot \mathbf{T} dS, \quad (3.1.6)$$

где ρ – плотность, $\mathbf{v}$ – трансляционная скорость, $\mathbf{T}$ – тензор силовых напряжений.

При решении задачи статики (или квазистатики) уравнение равновесия в локальной форме принимает вид

$$\nabla \cdot \mathbf{T} = 0. \quad (3.1.7)$$

Напряжения определяются соотношениями Дюамеля-Неймана:

$$\mathbf{T} = (\lambda \text{tr} \boldsymbol{\epsilon} - 3K \bar{\alpha} c) \mathbf{I} + 2\mu \boldsymbol{\epsilon}, \quad (3.1.8)$$

где $\bar{\alpha}$ – коэффициент линейного концентрационного расширения, λ , μ – коэффициенты Ламе, $K = 3\lambda + 2\mu$ – модуль объемного сжатия.

Тензор линейных деформаций определяется как

$$\boldsymbol{\epsilon} = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u})^S, \quad (3.1.9)$$

где индекс S означает симметричную часть тензора.

3.1.2. Начально-краевая задача в рамках классической теории

Задача массопругости решается для длинного цилиндра радиуса r_0 и длины L в цилиндрической системе координат (r, φ, z) . На боковой поверхности цилиндра поддерживается постоянная концентрация:

$$c|_{r=r_0} = c_0. \quad (3.1.10)$$

Боковая поверхность свободна от нагрузки:

$$\mathbf{e}_r \cdot \mathbf{T}|_{r=r_0} = \mathbf{0}, \quad (3.1.11)$$

и цилиндр не несет осевой нагрузки:

$$\int \int_S \mathbf{e}_z \cdot \mathbf{T} dS \Big|_{z=0, z=L} = \mathbf{0}. \quad (3.1.12)$$

Учитывая осевую симметрию и используя гипотезу плоских сечений, будем искать решение в виде:

$$c = c(r), \quad (3.1.13)$$

$$\mathbf{u} = u_r(r) \mathbf{e}_r + u_z(z) \mathbf{e}_z, \quad (3.1.14)$$

$$\varepsilon_{zz} = \frac{\partial u_z}{\partial z} = \text{const}. \quad (3.1.15)$$

В центре цилиндра зададим следующие граничные условия для концентрации и радиальных перемещений:

$$c'|_{r=0} = 0, \quad (3.1.16)$$

$$u_r|_{r=0} < \infty, \quad (3.1.17)$$

где $'$ означает производную по радиусу $\partial/\partial r$.

Подставляя определяющее соотношение для потока (3.1.5), записанное в общем виде, в баланс массы (3.1.2), получим одномерное уравнение диффузии:

$$r\dot{c} = [rD(c' + \bar{\beta}cF)]', \quad (3.1.18)$$

где $\cdot$ означает производную по времени. Термодинамическая сила определяется одним из двух способов:

$$F = [-K(\text{tr}\epsilon - 3\bar{\alpha}c)]' \quad (3.1.19)$$

при учете явления бародиффузии или $F = 0$ при моделировании процесса диффузии в соответствии с классическим законом Фика.

Согласно соотношению Дюамеля-Неймана (3.1.8), ненулевые компоненты тензора напряжений имеют вид:

$$\begin{aligned} T_{rr} &= (\lambda + 2\mu) u_r' + \lambda \left(\frac{u_r}{r} + \varepsilon_{zz} \right) - 3K\bar{\alpha}c, \\ T_{\varphi\varphi} &= \lambda (u_r' + \varepsilon_{zz}) + (\lambda + 2\mu) \frac{u_r}{r} - 3K\bar{\alpha}c, \\ T_{zz} &= \lambda \left(u_r' + \frac{u_r}{r} \right) + (\lambda + 2\mu) \varepsilon_{zz} - 3K\bar{\alpha}c, \end{aligned} \quad (3.1.20)$$

Уравнение равновесия (3.1.7) в координатном виде сведется к

$$(rT_{rr})' - T_{\varphi\varphi} = 0. \quad (3.1.21)$$

Дополняя баланс массы (3.1.18) уравнением равновесия (3.1.21) и условием (3.1.15), получим с учетом определяющих соотношений (3.1.5), (3.1.8)

окончательно следующую систему уравнений относительно c , ε_{zz} и u_r :

$$r\dot{c} = [rD(c' + \bar{\beta}cF)]', \quad \text{где} \quad (3.1.22)$$

$$F = [-(3\lambda + 2\mu)(\text{tr}\varepsilon - 3\bar{\alpha}c)]' \quad \text{или} \quad F = 0,$$

$$\int_0^{r_0} \left[(\lambda + 2\mu)\varepsilon_{zz} + \lambda \left(u_r' + \frac{u_r}{r} \right) - (3\lambda + 2\mu)\bar{\alpha}c \right] r dr = 0, \quad (3.1.23)$$

$$(ru_r')' - \frac{u_r}{r} - \frac{(3\lambda + 2\mu)}{(\lambda + 2\mu)}\bar{\alpha}rc' = 0. \quad (3.1.24)$$

Учтем, что коэффициент диффузии и упругие модули являются эффективными характеристиками и в общем случае зависят от радиуса (при неоднородном распределении пор в матрице).

3.1.3. Численный метод решения задачи массопругости в рамках классической теории

При разработке численного метода будем использовать подход, изложенный в главе 2. Для решения задачи введем рассмотренную в главе 2 одномерную разностную сетку r_i . Исходя из вида балансовых и определяющих соотношений, радиальные перемещения и концентрацию будем задавать в узлах сетки i , тогда как компоненты тензора напряжений и потока, а также коэффициент диффузии и упругие модули – в ячейках сетки (интервалах между узлами, $i + 1/2$), см. Рис. 2.1.

Будем использовать неявную численную схему. В начале нового шага по времени определим коэффициенты $D_{i+1/2}^{n+1}$, $\lambda_{i+1/2}^{n+1}$, $\mu_{i+1/2}^{n+1}$ и термодинамическую силу $F_{i+1/2}^{n+1}$. Для краткости записи номер нового шага по времени $(n + 1)$ будет в дальнейшем опускаться.

При вычислении термодинамической силы, определяемой через градиент

давления, сначала аппроксимируется величина давления в ячейках:

$$P_{i+\frac{1}{2}} = -\text{tr} \mathbf{T}_{i+\frac{1}{2}} \approx - \left(3\lambda_{i+\frac{1}{2}} + 2\mu_{i+\frac{1}{2}} \right) \left(\frac{u_{r_{i+1}}^n - u_{r_i}^n}{\Delta r_i} + \frac{u_{r_{i+1}}^n + u_{r_i}^n}{2r_{c_i}} + \varepsilon_{zz}^n \right), \quad (3.1.25)$$

после чего аппроксимируется градиент давления (термодинамическая сила, вызывающая дополнительный поток):

$$F_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{\Delta r_i} \left(\frac{P_{i+1+\frac{1}{2}} + P_{i+\frac{1}{2}}}{2} - \frac{P_{i+\frac{1}{2}} + P_{i-\frac{1}{2}}}{2} \right) = \frac{1}{\Delta r_i} \frac{P_{i+1+\frac{1}{2}} - P_{i-\frac{1}{2}}}{2}. \quad (3.1.26)$$

Аппроксимируем уравнения (3.1.22)–(3.1.24). Учтем, что в центре цилиндра должны выполняться интегральные балансовые соотношения: баланс массы (3.1.2) и баланс количества движения (3.1.6) при равенстве нулю левой части. На боковой поверхности цилиндра должен выполняться баланс (3.1.6) при равенстве нулю левой части, в то время как концентрация фиксируется.

Аппроксимация уравнения диффузии (3.1.22) будет иметь следующий вид во внутренних узлах:

$$\begin{aligned} r_i \frac{c_i - c_i^n}{\Delta t} = & \frac{1}{\Delta r_{c_i}} \left[D_{i+\frac{1}{2}} \frac{r_{i+\frac{1}{2}}}{\Delta r_i} (c_{i+1} - c_i) - D_{i-\frac{1}{2}} \frac{r_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta r_{i-1}} (c_i - c_{i-1}) \right] + \\ & + \frac{\bar{\beta}}{\Delta r_{c_i}} \left[r_{i+\frac{1}{2}} D_{i+\frac{1}{2}} \left(\frac{|F_{i+\frac{1}{2}}| + F_{i+\frac{1}{2}}}{2} c_{i+1} - \frac{|F_{i+\frac{1}{2}}| - F_{i+\frac{1}{2}}}{2} c_i \right) - \right. \\ & \left. - r_{i-\frac{1}{2}} D_{i-\frac{1}{2}} \left(\frac{|F_{i-\frac{1}{2}}| + F_{i-\frac{1}{2}}}{2} c_i - \frac{|F_{i-\frac{1}{2}}| - F_{i-\frac{1}{2}}}{2} c_{i-1} \right) \right], \quad i = 1, \dots, I-2, \end{aligned} \quad (3.1.27)$$

где Δt – шаг по времени. При аппроксимации слагаемого $(\bar{\beta} c F)'$ использовалась противопотоковая схема.

В результате аппроксимации баланса массы в 0-ом узле получим:

$$\frac{c_1 - c_0}{\Delta r_0} = 0. \quad (3.1.28)$$

Интегральное уравнение (3.1.23) для нахождения аксиальной деформации аппроксимируем следующим образом:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{zz} = (r_{i+1} - r_i) \times \quad (3.1.29) \\ \times \frac{\sum_{i=0}^{I-2} \left[-\lambda_{i+\frac{1}{2}} \frac{r_{i+\frac{1}{2}}}{\Delta r_i} (u_{r_{i+1}}^n - u_{r_i}^n) - \lambda_{i+\frac{1}{2}} \frac{u_{r_{i+1}}^n + u_{r_i}^n}{2} + \bar{\alpha} \left(3\lambda_{i+\frac{1}{2}} + 2\mu_{i+\frac{1}{2}} \right) r_{i+\frac{1}{2}} \frac{c_{i+1} + c_i}{2} \right]}{\sum_{i=0}^{I-2} \left(\lambda_{i+\frac{1}{2}} + \mu_{i+\frac{1}{2}} \right) r_{i+\frac{1}{2}} (r_{i+1} - r_i)}. \end{aligned}$$

Уравнение (3.1.24) для нахождения радиальных перемещений будет аппроксимироваться во внутренних узлах следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta r_{c_i}} \left[\left(\lambda_{i+\frac{1}{2}} + 2\mu_{i+\frac{1}{2}} \right) \frac{r_{i+\frac{1}{2}}}{\Delta r_i} (u_{r_{i+1}} - u_{r_i}) - \left(\lambda_{i-\frac{1}{2}} + 2\mu_{i-\frac{1}{2}} \right) \frac{r_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta r_{i-1}} (u_{r_i} - u_{r_{i-1}}) \right] + \\ + \frac{1}{\Delta r_{c_i}} \left(\lambda_{i+\frac{1}{2}} r_{i+\frac{1}{2}} - \lambda_{i-\frac{1}{2}} r_{i-\frac{1}{2}} \right) \varepsilon_{zz} - \quad (3.1.30) \\ - \frac{\bar{\alpha}}{\Delta r_{c_i}} \left[\left(3\lambda_{i+\frac{1}{2}} + 2\mu_{i+\frac{1}{2}} \right) r_{i+\frac{1}{2}} \frac{c_{i+1} + c_i}{2} - \left(3\lambda_{i-\frac{1}{2}} + 2\mu_{i-\frac{1}{2}} \right) r_{i-\frac{1}{2}} \frac{c_i + c_{i-1}}{2} \right] - \\ - \frac{\lambda_{i+\frac{1}{2}} + \lambda_{i-\frac{1}{2}} + 2 \left(\mu_{i+\frac{1}{2}} + \mu_{i-\frac{1}{2}} \right)}{2} \frac{1}{r_i} u_{r_i} - \frac{\lambda_{i+\frac{1}{2}} + \lambda_{i-\frac{1}{2}}}{2} \varepsilon_{zz} + \\ + \frac{3 \left(\lambda_{i+\frac{1}{2}} + \lambda_{i-\frac{1}{2}} \right) + 2 \left(\mu_{i+\frac{1}{2}} + \mu_{i-\frac{1}{2}} \right)}{2} \bar{\alpha} c_i = 0. \end{aligned}$$

При аппроксимации баланса количества движения в 0-ом узле из ограниченности решения следует $u_{r_0} = 0$.

В $(I - 1)$ -ом узле баланс количества движения аппроксимируется как

$$\begin{aligned}
& -\frac{r_{I-1-\frac{1}{2}}}{\Delta r_{c_{I-1}}} \left[\left(\lambda_{I-1-\frac{1}{2}} + 2\mu_{I-1-\frac{1}{2}} \right) \frac{u_{r_{I-1}} - u_{r_{I-2}}}{\Delta r_{I-2}} + \lambda_{I-1-\frac{1}{2}} \varepsilon_{zz} - \right. \\
& \quad \left. - \bar{\alpha} \left(3\lambda_{I-1-\frac{1}{2}} + 2\mu_{I-1-\frac{1}{2}} \right) \frac{c_{I-1} + c_{I-2}}{2} \right] - \\
& \quad - \lambda_{I-1-\frac{1}{2}} \frac{u_{r_{I-1}}}{\Delta r_{c_{I-1}}} - \left(\lambda_{I-1-\frac{1}{2}} + 2\mu_{I-1-\frac{1}{2}} \right) \frac{u_{r_{I-1}}}{r_{I-1}} - \\
& \quad - \lambda_{I-1-\frac{1}{2}} \varepsilon_{zz} + \left(3\lambda_{I-1-\frac{1}{2}} + 2\mu_{I-1-\frac{1}{2}} \right) \bar{\alpha} c_{I-1} = 0.
\end{aligned} \tag{3.1.31}$$

Для решения разностных уравнений (3.1.27), (3.1.28), (3.1.30), (3.1.31) применяется метод скалярной прогонки [143].

3.1.4. Влияние заданной неоднородной микроструктуры

Выбор конкретной матрицы и конкретного диффундирующего вещества не должен влиять на решение качественно. Для определенности проанализируем распределение водорода в алюминии, характеризующимся упругими модулями $\mu_0 = 27$ ГПа и $E_0 = 70$ ГПа; молярная масса $m_S = 0.027$ кг/моль и плотность $\rho = 2700$ кг/м³. Коэффициент линейного концентрационного расширения $\bar{\alpha} = 1.5e - 6$. Процесс диффузии происходит при комнатной температуре $T = 293$ К, коэффициент диффузии $D_0 = 1e - 12$ м²/с. Концентрация определяется через 50 часов (до установления стационарного режима с целью анализа эффекта локального увеличения концентрации).

Зададим неоднородное распределение пор в материале посредством экспоненциальной зависимости объемной доли неоднородностей от радиальной координаты $\phi = 0.1 \exp(-(r_0 - r)/r_0)$. Ограничимся рассмотрением сплюснутых сфероидальных пор с $\gamma = 0.1$, вытянутых сфероидальных пор с $\gamma = 10$ и сферических пор ($\gamma = 1$). Определим концентрационный профиль при задании диффузионного потока в соответствии с классическим законом Фика.

Концентрационные профили, построенные с учетом эффективных коэф-

коэффициентов диффузии $D^{eff} = D^{eff}(\phi, s, \gamma, \lambda)$, посчитанных по выведенным в главе 1 формулам, основанным на применении метода Максвелла, показаны на Рис. 3.1–3.2. Показано влияние параметра сегрегации s , определяющего скачок концентрации на границе раздела матрица/изолированная пора, и приведено сравнение с решением аналогичной задачи диффузии с постоянным коэффициентом диффузии D_0 .

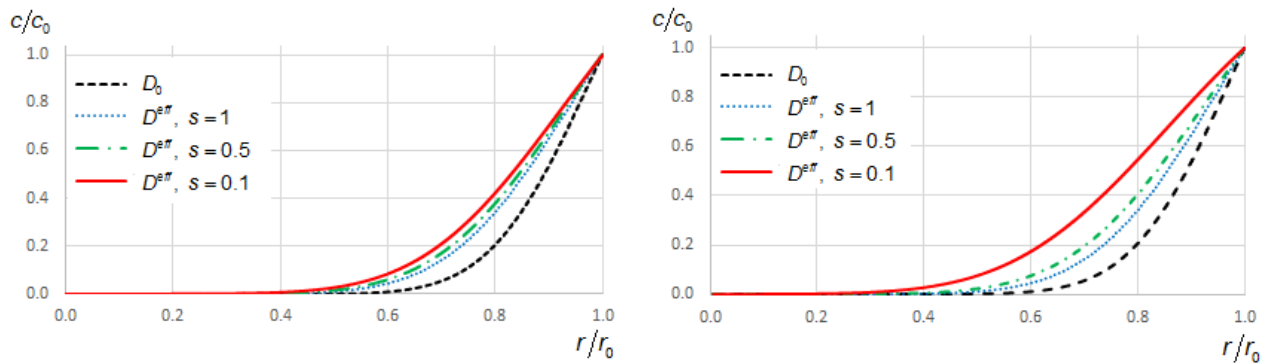


Рис. 3.1. Концентрационные профили: материал со сплюснутыми (слева) и вытянутыми (справа) сфероидальными порами

Графики на Рис. 3.1 построены при произвольном распределении по ориентациям сплюснутых и вытянутых сфероидальных пор. Увеличение скачка концентрации на границе матрица/пора (уменьшение параметра сегрегации) приводит к большей насыщенности материала и увеличению локальной концентрации примеси. При этом вытянутые сфероидальные поры с $\gamma = 10$ оказывают большее влияние, чем сплюснутые сфероидальные поры с $\gamma = 0.1$.

Графики на Рис. 3.2 построены при рассмотрении материала со сферическими порами. Решение задачи диффузии с эффективным коэффициентом диффузии оказалось близким к решению, полученному при постоянном коэффициенте диффузии при любых значениях параметра сегрегации. Такой результат ожидаем, поскольку, как было показано в главе 1, сегрегация не оказывает заметного влияния на свойства материала со сферическими порами при малой объемной доле неоднородностей. Концентрационный профиль построен при $s = 0.1$.

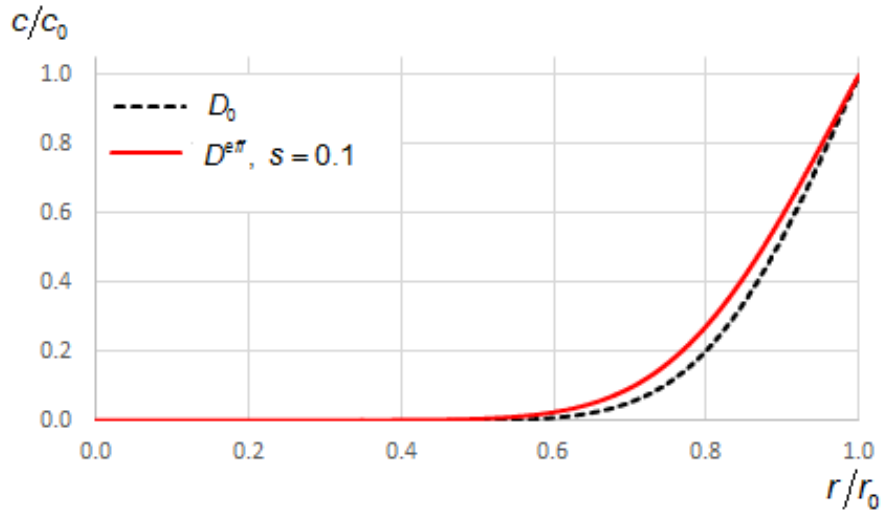


Рис. 3.2. Концентрационные профили: материал со сферическими порами

Наличие преимущественной ориентации сплюснутых сфероидальных пор вдоль $\mathbf{e}_z$ или $\mathbf{e}_\varphi$, а также произвольное распределение осей симметрии сплюснутых сфероидальных пор в плоскости с нормалью $\mathbf{e}_r$ приводят к результатам, близким к представленным на Рис. 3.1 (слева). Другое распределение по ориентациям (когда оси симметрии сплюснутых сфероидальных пор ориентированы преимущественно вдоль $\mathbf{e}_r$ или распределены в плоскости с нормалью $\mathbf{e}_z$ или $\mathbf{e}_\varphi$) приводит к концентрационным профилям, практически совпадающим с полученным при постоянном значении коэффициента диффузии, т.к. наличие ориентированных таким образом сплюснутых сфероидальных пор практически не влияет на диффузию вдоль соответствующих направлений. В то же время, в случае вытянутых сфероидальных пор

- 1) Произвольное распределение по ориентациям,
- 2) Произвольное распределение осей симметрии в плоскости с нормалью $\mathbf{e}_z$ или $\mathbf{e}_\varphi$,
- 3) Преимущественная ориентация вдоль $\mathbf{e}_r$

приводит к распределению диффундирующего вещества, отличному от представленного на Рис. 3.1 (справа). Сравнение результатов представлено на Рис.

3.3. Наибольшая насыщаемость наблюдается в материале с порами, имеющими преимущественную ориентацию. Отметим, что в случае, когда оси симметрии вытянутых сфероидальных пор имеют преимущественную ориентацию вдоль $\mathbf{e}_z$ или $\mathbf{e}_\varphi$, а также когда они распределены в плоскости с нормалью $\mathbf{e}_r$, концентрационные профили близки к полученным при постоянном значении коэффициента диффузии.

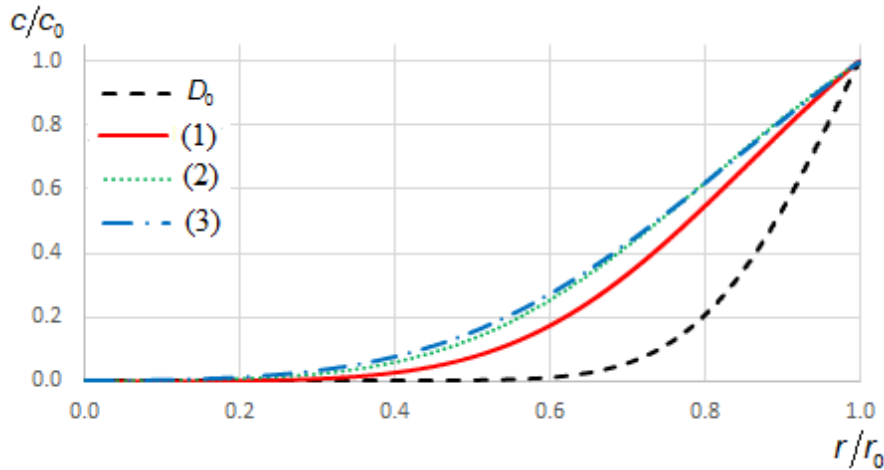


Рис. 3.3. Концентрационные профили: материал с вытянутыми сфероидальными порами с различным распределением по ориентациям, см. пояснения в тексте

Таким образом, различие между решениями, полученными при рассмотрении эффективного коэффициента диффузии и постоянного коэффициента диффузии, совпадающего с коэффициентом диффузии матрицы композита, может быть существенным. При этом в общем случае необходимо учитывать параметр сегрегации, форму пор и их ориентацию.

3.1.5. Влияние растрескивания в процессе диффузии

Как и в предыдущем разделе, проанализируем распределение водорода в алюминии через 50 часов наводороживания при комнатной температуре. Рассмотрим простейшую линейную зависимость объемной доли неоднородностей от концентрации: $\phi = 0.1c$. Такой подход не позволяет описать зарождение и

развитие дефектов, но позволяет приближенно оценить влияние растрескивания, вызванного непосредственно накоплением диффундирующего вещества, на его перераспределение. Ограничимся рассмотрением сплюснутых сферoidalных пор с $\gamma = 0.1$, параметр сегрегации примем равным $s = 0.1$.

Построим профиль распределения примеси при описании диффузионного потока в соответствии с классическим законом Фика ($F = 0$). В этом случае решается частично связанная задача: напряженно-деформированное состояние материала зависит от распределения концентрации, тогда как процесс диффузии не зависит от напряженно-деформированного состояния.

Концентрационный профиль, построенный при решении задачи диффузии с эффективным коэффициентом диффузии $D^{eff} = D^{eff}(\phi(c), s, \gamma, \lambda)$, посчитанным по выведенным в главе 1 формулам при рассмотрении схемы Максвелла, показан на Рис. 3.4. Представлено сравнение результата с решением аналогичной задачи диффузии с постоянным коэффициентом диффузии. Учет растрескивания приводит к большей насыщаемости материала и увеличению локальной концентрации примеси.

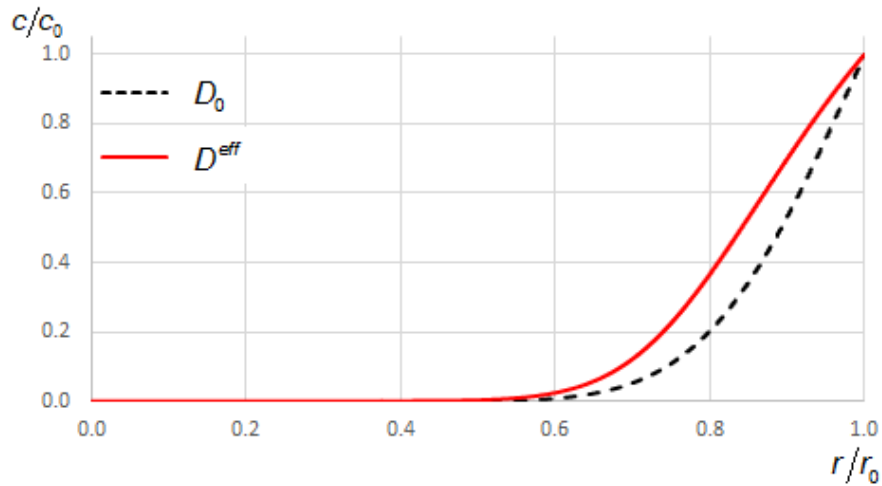


Рис. 3.4. Концентрационные профили при задании потока в соответствии с классическим законом Фика

Учтем теперь в определяющем соотношении для диффузионного потока термодинамическую силу, связанную с градиентом давления. В этом случае

задача массопругости является связанной и может быть учтено влияние и эффективного коэффициента диффузии $D^{eff} = D^{eff}(\phi(c), s, \gamma, \lambda)$, и эффективных упругих модулей $K^{eff} = K^{eff}(\phi(c), s, \gamma, \lambda)$, $\mu^{eff} = \mu^{eff}(\phi(c), s, \gamma, \lambda)$. Соответствующие концентрационные профили показаны на Рис. 3.5. Проведено сравнение четырех вариантов учета влияния микроструктуры на процесс диффузии за счет рассмотрения

- Эффективного коэффициента диффузии и постоянных модулей упругости, совпадающих с модулями упругости матрицы композита;
- Эффективного коэффициента диффузии и эффективных модулей упругости;
- Постоянного коэффициента диффузии, совпадающего с коэффициентом диффузии матрицы композита, и эффективных модулей упругости;
- Постоянных коэффициентов диффузии и упругих модулей, совпадающих со значениями соответствующих коэффициентов матрицы композита.

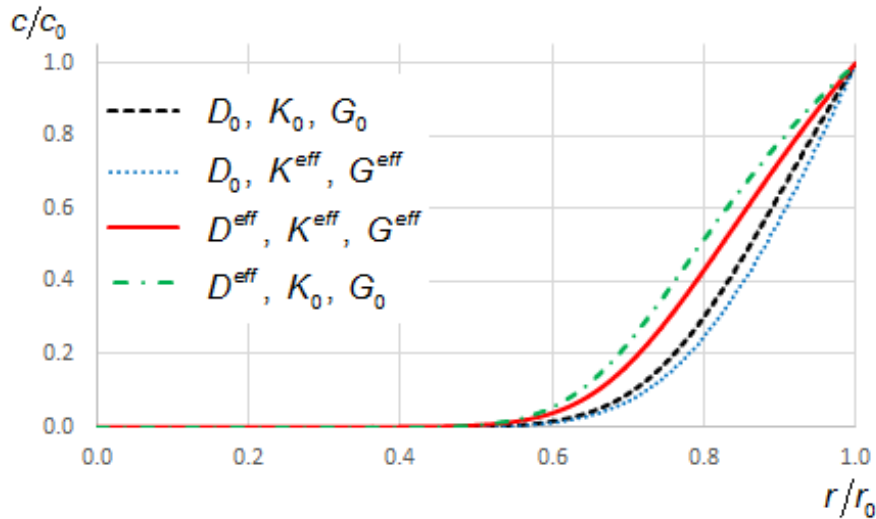


Рис. 3.5. Концентрационные профили при определении потока с учетом бародиффузии: влияние разных эффективных свойств

Учет только эффективного коэффициента диффузии увеличивает содержание диффундирующего вещества в материала, тогда как совокупный учет

и эффективного коэффициента диффузии, и эффективных модулей упругости приводит к меньшему значению. Учет только эффективных модулей упругости, в свою очередь, еще больше уменьшает концентрацию. Причиной такого результата является то, что образование пор увеличивает коэффициент диффузии материала и, наоборот, уменьшает его упругие модули. В результате поток, вызванный градиентом концентрации, увеличивается, тогда как поток, вызванный градиентом давления, наоборот, уменьшается. Необходимо, по всей видимости, учитывать изменения различных физических свойств, вызванные определенной микроструктурой. Сравнение Рис. 3.4 и 3.5 подтверждает такой вывод, поскольку красные кривые проходят ближе друг другу, чем другие.

Несмотря на ограниченность применимости соотношений податливость-диффузия, выведенных в главе 1, при наличии информации о параметре сегрегации эффективные модули упругости могут быть найдены как напрямую с помощью методов гомогенизации, так и с помощью этих соотношений через эффективный коэффициент диффузии. На Рис. 3.6 представлены концентрационные профили, построенные при использовании двух подходов. Видно, что разница незначительна и, таким образом, в случае пористого материала нет необходимости применять методы гомогенизации для определения всех физических свойства – достаточно только оценить один “тип” свойств.

3.2. Моделирование процесса диффузии вблизи поверхности

Раздел посвящен моделированию диффузии вблизи поверхности деформируемого твердого тела с учетом влияния микроструктуры материала. Описывается диффузия с учетом влияния напряженно-деформированного состояния материала, определенного в главе 2 в рамках микрополярной теории.

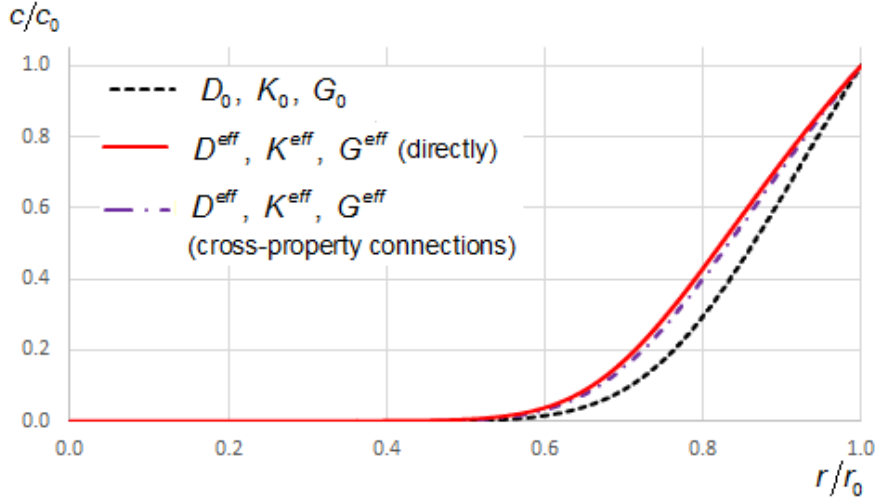


Рис. 3.6. Концентрационные профили при определении потока с учетом бародиффузии: влияние способа определения эффективных упругих свойств

Определяющее соотношение для потока выбирается таким образом, чтобы учесть влияние найденных в главе 2 касательных напряжений и сдвиговых деформаций, характеризующих поведение поверхностного слоя.

3.2.1. Задача массопругости в рамках микрополярной теории

Опишем процесс диффузии вблизи поверхности с учетом влияния напряженно-деформированного состояния материала. Учтем, что причиной внутренних напряжений и деформаций является, с одной стороны, накопление диффундирующего вещества, с другой стороны – распределенный момент на боковой поверхности.

Концентрация диффундирующего вещества определяется балансом массы (3.1.1), который в локальной форме имеет вид (3.1.2). Для учета возникающих в материале напряжений и деформаций можно ввести выражение для потока через градиент химического потенциала системы μ^{ChP} :

$$\mathbf{J} = -Mc\nabla\mu^{ChP}, \quad (3.2.1)$$

где $M = D/RT$ – подвижность диффундирующего вещества ($R = 8.31455$ Дж/моль·К – универсальная газовая постоянная, T – абсолютная температура).

Химический потенциал системы, состоящей из диффундирующего газа и деформируемой матрицы, есть сумма их химических потенциалов:

$$\mu^{ChP} = \mu_G + \mu_S. \quad (3.2.2)$$

Примем, что химический потенциал газа определяется выражением для идеального газа

$$\mu_G = \mu_G^0 + RT \ln c, \quad (3.2.3)$$

где μ_G^0 – химический потенциал газа в стандартном состоянии.

В отсутствие химического потенциала матрицы ($\mu_S = 0$), уравнение (3.2.1) сводится к классическому закону Фика, связывающему поток с градиентом концентрации.

Химический потенциал деформируемого твердого тела пропорционален следу тензора энергии-импульса Эшелби Σ [170]:

$$\mu_S = \tilde{m}_S \left(f_S^0 + \frac{1}{\rho} \text{tr} \Sigma \right), \quad (3.2.4)$$

где $\tilde{m}_S$ – молярная масса тела, f_S^0 – плотность свободной энергии материала в ненапряженном состоянии, ρ – плотность системы, которую можно считать равной плотности матрицы материала ρ_S .

В рамках классической линейной теории упругости вводится тензор деформации

$$\epsilon = \varepsilon = (\nabla \mathbf{u})^S, \quad (3.2.5)$$

а в рамках микрополярной теории – тензоры деформации растяжения-сжатия

и изгиба-кручения

$$\boldsymbol{\epsilon} = \nabla \mathbf{u} + \mathbf{I} \times \boldsymbol{\theta}, \quad \boldsymbol{\kappa} = \nabla \boldsymbol{\theta}. \quad (3.2.6)$$

В рамках классической линейной теории упругости тензор энергии-импульса Эшелби определяется следующим образом [68]:

$$\boldsymbol{\Sigma} = \boldsymbol{\Sigma}^{Cl} = W^{Cl} \mathbf{I} - (\nabla \mathbf{u} - \boldsymbol{\epsilon}^*) \cdot \mathbf{T}, \quad (3.2.7)$$

где W^{Cl} – плотность энергии упругой деформации, $\boldsymbol{\epsilon}^*$ – тензор собственных деформаций, инициированных диффундирующим веществом.

След тензора энергии-импульса Эшелби определяется выражением

$$\text{tr} \boldsymbol{\Sigma} = \text{tr} \boldsymbol{\Sigma}^{Cl} = 3W^{Cl} - (\nabla \mathbf{u} - \boldsymbol{\epsilon}^*) \cdot \cdot \mathbf{T}. \quad (3.2.8)$$

Плотность энергии упругой деформации есть квадратичная функция

$$W^{Cl} = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u} - \boldsymbol{\epsilon}^*) \cdot \cdot {}^4\mathbf{C} \cdot \cdot (\nabla \mathbf{u} - \boldsymbol{\epsilon}^*),$$

и в результате выражение (3.2.8) можно переписать в следующем виде:

$$\text{tr} \boldsymbol{\Sigma} = \text{tr} \boldsymbol{\Sigma}^{Cl} = \frac{1}{2} \left((\nabla \mathbf{u})^S - \boldsymbol{\epsilon}^* \right) \cdot \cdot {}^4\mathbf{C} \cdot \cdot \left((\nabla \mathbf{u})^S - \boldsymbol{\epsilon}^* \right). \quad (3.2.9)$$

Согласно [105], тензор энергии-импульса Эшелби линейного микрополярного материала определяется как

$$\boldsymbol{\Sigma} = \boldsymbol{\Sigma}^{MP} = W^{MP} \mathbf{I} - (\nabla \mathbf{u} - \boldsymbol{\epsilon}^*) \cdot \mathbf{T}^T - (\nabla \boldsymbol{\theta}) \cdot \mathbf{M}^T, \quad (3.2.10)$$

где W^{MP} – плотность энергии упругой деформации, определяемая в рамках микрополярной теории формулой

$$W^{MP} = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u} + \mathbf{I} \times \boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\epsilon}^*) \cdot \cdot {}^4\mathbf{C} \cdot \cdot (\nabla \mathbf{u} + \mathbf{I} \times \boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\epsilon}^*) + \frac{1}{2} \nabla \boldsymbol{\theta} \cdot \cdot {}^4\mathbf{D} \cdot \cdot \nabla \boldsymbol{\theta}.$$

Тогда след тензора энергии-импульса Эшелби будет вычисляться как

$$\begin{aligned}\text{tr}\Sigma &= \text{tr}\Sigma^{MP} = 3W^{MP} - (\nabla\mathbf{u} - \boldsymbol{\varepsilon}^*) \cdot \cdot \mathbf{T}^T - (\nabla\boldsymbol{\theta}) \cdot \cdot \mathbf{M}^T = \\ &= \frac{1}{2} (\nabla\mathbf{u} - \boldsymbol{\varepsilon}^*) \cdot \cdot {}^4\mathbf{C} \cdot \cdot (\nabla\mathbf{u} + \mathbf{I} \times \boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\varepsilon}^*) + \\ &+ \frac{3}{2} (\mathbf{I} \times \boldsymbol{\theta}) \cdot \cdot {}^4\mathbf{C} \cdot \cdot (\nabla\mathbf{u} + \mathbf{I} \times \boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\varepsilon}^*) + \frac{1}{2} \nabla\boldsymbol{\theta} \cdot \cdot {}^4\mathbf{D} \cdot \cdot \nabla\boldsymbol{\theta}.\end{aligned}\quad (3.2.11)$$

Итак, в рамках классической теории сплошных сред определяющее соотношение для потока примет вид

$$\mathbf{J} = -D \left(\nabla c + c \frac{\tilde{m}_S}{\rho_S} \frac{1}{RT} \frac{1}{2} \nabla [(\nabla\mathbf{u} - \boldsymbol{\varepsilon}^*) \cdot \cdot {}^4\mathbf{C} \cdot \cdot (\nabla\mathbf{u} - \boldsymbol{\varepsilon}^*)] \right), \quad (3.2.12)$$

а в рамках микрополярной теории:

$$\begin{aligned}\mathbf{J} &= -D \left(\nabla c + c \frac{\tilde{m}_S}{\rho_S} \frac{1}{RT} \nabla \left[\frac{1}{2} (\nabla\mathbf{u} - \boldsymbol{\varepsilon}^*) \cdot \cdot {}^4\mathbf{C} \cdot \cdot (\nabla\mathbf{u} + \mathbf{I} \times \boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\varepsilon}^*) + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{3}{2} (\mathbf{I} \times \boldsymbol{\theta}) \cdot \cdot {}^4\mathbf{C} \cdot \cdot (\nabla\mathbf{u} + \mathbf{I} \times \boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\varepsilon}^*) + \frac{1}{2} \nabla\boldsymbol{\theta} \cdot \cdot {}^4\mathbf{D} \cdot \cdot \nabla\boldsymbol{\theta} \right] \right)\end{aligned}\quad (3.2.13)$$

Вторые слагаемые в скобках в выражениях (3.2.12), (3.2.13) выступают в роли обобщенных термодинамических сил. Обратим внимание на то, что при равенстве нулю неклассических упругих модулей микрополярная теория сводится к классической.

Альтернативным способом учета влияния напряженно-деформированного состояния материала на процесс диффузии является рассмотрение зависимости коэффициента диффузии от полей напряжений и деформации. Рассмотрим предложенную в [122] зависимость коэффициента диффузии от энергии упругой деформации, модифицированную для учета влияния знака нормальных напряжений:

$$D = D_0 e^{\frac{\tilde{m}_S + \tilde{m}_H}{\rho} \frac{\tilde{W}}{RT}}, \quad (3.2.14)$$

где D_0 – постоянный коэффициент диффузии в материале, W – плотность

энергии упругой деформации, определяемая в рамках классической или в рамках микрополярной теории, при этом

$$\tilde{W} = \frac{1}{2} (\text{sgn}(\text{tr} \mathbf{T}) \mathbf{T}_b \cdot \cdot \boldsymbol{\epsilon}_b + \text{dev} \mathbf{T} \cdot \cdot \text{dev} \boldsymbol{\epsilon}). \quad (3.2.15)$$

Для общности записи используем следующее представление для потока:

$$\mathbf{J} = -D(\nabla c + c \mathbf{F}). \quad (3.2.16)$$

Для нахождения дополнительной термодинамической силы $\mathbf{F}$ определим напряженно-деформированное состояние матрицы. Поведение материала определяется балансами количества движения и кинетического момента. При решении задачи (квази)статики уравнения равновесия в локальной форме имеют вид

$$\nabla \cdot \mathbf{T} = 0, \quad (3.2.17)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{M} + \mathbf{T}_\times = 0. \quad (3.2.18)$$

Предположим, что накопление диффундирующего вещества в материале приводит только к дилатационному расширению. В таком случае тензоры силовых и моментных напряжений находятся из определяющих соотношений

$$\mathbf{T} = (\lambda \text{tr} \boldsymbol{\epsilon} - 3K \bar{\alpha} c) \mathbf{I} + 2\mu \boldsymbol{\epsilon}^S + 2\mu \frac{N^2}{1 - N^2} \boldsymbol{\epsilon}^A, \quad (3.2.19)$$

$$\mathbf{M} = 2\mu l_t^2 \frac{1 - \psi}{\psi} \text{tr} \boldsymbol{\kappa} \mathbf{I} + 2\mu l_t^2 \boldsymbol{\kappa}^s + 2\mu (l_t^2 - 4l_b^2) \boldsymbol{\kappa}^A. \quad (3.2.20)$$

3.2.2. Начально-краевая задача в рамках микрополярной теории

Задача массопругости решается для длинного цилиндра радиуса r_0 и длины L в цилиндрической системе координат (r, φ, z) . На боковой поверхности цилиндра поддерживается постоянная концентрация:

$$c|_{r=r_0} = c_0. \quad (3.2.21)$$

Боковая поверхность свободна от нагрузки

$$\mathbf{e}_r \cdot \mathbf{T}|_{r=r_0} = \mathbf{0}, \quad (3.2.22)$$

и на ней задан распределенный момент

$$\mathbf{e}_r \cdot \mathbf{M}|_{r=r_0} = M_0 \mathbf{e}_\varphi, \quad (3.2.23)$$

Цилиндр не несет осевой нагрузки:

$$\int \int_S \mathbf{e}_z \cdot \mathbf{T} dS \Big|_{z=0, z=L} = 0, \quad (3.2.24)$$

$$\int \int_S \mathbf{e}_z \cdot \mathbf{M} dS \Big|_{z=0, z=L} = 0. \quad (3.2.25)$$

Учитывая осевую симметрию и предполагая, что все сечения ведут себя

одинаково, будем искать решение в виде:

$$c = c(r), \quad (3.2.26)$$

$$\mathbf{u} = u_r(r) \mathbf{e}_r + u_z(r, z) \mathbf{e}_z, \quad (3.2.27)$$

$$\varepsilon_{zz} = \frac{\partial u_z}{\partial z} = \text{const}, \quad (3.2.28)$$

$$\boldsymbol{\theta} = \theta_r(r) \mathbf{e}_r + \theta_z(r) \mathbf{e}_z. \quad (3.2.29)$$

Из предположения (3.2.28) следует, что

$$u_z(r, z) = u_z(r) + u_z(z). \quad (3.2.30)$$

Действительно, согласно принципу суперпозиции линейной теории упругости, реакция на сложное нагружение равна сумме реакций на каждое отдельное нагружение. В соответствии с этим принципом, перемещение, вызванное накоплением диффундирующего вещества и распределенным моментом на боковой поверхности, можно рассматривать как сумму перемещений, инициированных каждой из причин в отдельности. В рамках классической теории упругости предполагается, что аксиальные перемещения, вызванные в таком случае только накоплением диффундирующего вещества, зависят в силу гипотезы плоских сечений только от аксиальной координаты (см. раздел 3.1). В рамках микрополярной теории при отсутствии примеси в материале предполагается, что решение зависит только от радиальной координаты (см. главу 2). В таком случае общее решение, являющееся суммой этих двух, действительно имеет вид (3.2.30).

В центре цилиндра зададим следующие граничные условия:

$$c'|_{r=0} = 0, \quad (3.2.31)$$

$$u_r|_{r=0} < \infty, \quad u_z(r)|_{r=0} = 0, \quad \theta_r|_{r=0} = \theta_\varphi(r)|_{r=0} = 0. \quad (3.2.32)$$

Подставляя определяющее соотношение для потока (3.2.16), записанное в общем виде, в баланс массы (3.1.2), получим одномерное уравнение

$$r\dot{c} = [rD(c' + cF)]', \quad (3.2.33)$$

где дополнительная термодинамическая сила определяется одним из двух способов:

$$F = \frac{1}{RT} \frac{\tilde{m}_S}{\rho_S} (\text{tr} \mathbf{\Sigma})' \quad (3.2.34)$$

или $F = 0$.

В соответствии с (3.2.19), ненулевые компоненты тензора силовых напряжений имеют вид:

$$\begin{aligned} T_{rr} &= (\lambda + 2\mu) u_r' + \lambda \left(\frac{u_r}{r} + \varepsilon_{zz} \right) - 3K\bar{\alpha}c, \\ T_{\varphi\varphi} &= \lambda (u_r' + \varepsilon_{zz}) + (\lambda + 2\mu) \frac{u_r}{r} - 3K\bar{\alpha}c, \\ T_{zz} &= \lambda \left(u_r' + \frac{u_r}{r} \right) + (\lambda + 2\mu) \varepsilon_{zz} - 3K\bar{\alpha}c, \\ T_{z\varphi} &= -T_{\varphi z} = 2G \frac{N^2}{1 - N^2} \theta_r, \\ T_{zr} &= \frac{G}{1 - N^2} ((1 - 2N^2) u_z' - 2N^2 \theta_\varphi), \quad T_{rz} = \frac{G}{1 - N^2} (u_z' + 2N^2 \theta_\varphi), \end{aligned} \quad (3.2.35)$$

Ненулевые компоненты тензора моментных напряжений в соответствии с (3.2.20) имеют вид

$$\begin{aligned} M_{rr} &= \frac{2\mu l_t^2}{\psi} \left[\theta_r' + (1 - \psi) \frac{\theta_r}{r} \right], \quad M_{\varphi\varphi} = \frac{2\mu l_t^2}{\psi} \left[(1 - \psi) \theta_r' + \frac{\theta_r}{r} \right], \\ M_{r\varphi} &= 2\mu \left[(2l_b^2 - l_t^2) \frac{\theta_\varphi}{r} + 2l_b^2 \theta_\varphi' \right], \quad M_{\varphi r} = 2\mu \left[(l_t^2 - 2l_b^2) \theta_\varphi' - 2l_b^2 \frac{\theta_\varphi}{r} \right]. \end{aligned} \quad (3.2.36)$$

Система уравнений относительно c , ε_{zz} , u_r , $u_z(r)$, θ_φ примет вид

$$r\dot{c} = [rD(c' + cF)]', \quad \text{где} \quad F = \frac{1}{RT} \frac{\tilde{m}_S}{\rho_S} (\text{tr} \Sigma)' \quad \text{или} \quad F = 0, \quad (3.2.37)$$

$$\int_0^{r_0} \left[(\lambda + 2\mu) \varepsilon_{zz} + \lambda \left(u_r' + \frac{u_r}{r} \right) - (3\lambda + 2\mu) \alpha c \right] r dr = 0, \quad (3.2.38)$$

$$(ru_r')' - \frac{u_r}{r} - \frac{(3\lambda + 2\mu)}{(\lambda + 2\mu)} \alpha ((rc)' - c) = 0, \quad (3.2.39)$$

$$(ru_z')' + 2N^2 (r\theta_\varphi)' = 0, \quad (3.2.40)$$

$$2l_b^2 (r\theta_\varphi')' - \left(\frac{2}{r} l_b^2 + r \frac{2N^2}{1 - N^2} \right) \theta_\varphi - r \frac{N^2}{1 - N^2} u_z' = 0. \quad (3.2.41)$$

Здесь учтено, что θ_r имеет тривиальное решение.

Видно, что система уравнений является частично связанной и может быть разделена на две системы: относительно c , ε_{zz} , u_r и относительно $u_z(r)$, θ_φ . При этом концентрация зависит (через химический потенциал или энергию в зависимости коэффициента диффузии) от компоненты аксиальных перемещений и от микроповорота вокруг $\mathbf{e}_\varphi$, в то время как $u_z(r)$ и θ_φ не зависят от концентрации и возникают только из-за распределенного момента на боковой поверхности. Решение системы уравнений относительно $u_z(r)$ и θ_φ описывает поведение ненасыщенного образца, которое в дальнейшем не меняется. Таким образом, решаемая задача массопругости является частично связанной, а именно: решение микрополярной задачи может оказывать влияние на распределение диффундирующего вещества, но не зависит от этого распределения, в то время как напряженно-деформированное состояние, вызванное неравномерным распределением диффундирующего вещества, и накопление примеси оказывают взаимное влияние. Для учета влияния накопления диффундирующего вещества на решение микрополярной задачи (т.е. для решения полностью связанной задачи) было бы необходимо учесть, что примесь инициирует не только дилатационное расширение материала, но

также и вращения частиц среды (зерен). Данное исследование выходит за рамки диссертационной работы.

В разделе 2.4 главы 2 обсуждалось, что на основании сравнения теоретических результатов и экспериментальных данных о микроструктуре материала можно оценить отношение характерной длины для деформации изгиба к параметру асимметрии l_b/N . При этом, судя по всему, параметр асимметрии металлов $N \approx 1$. Тем не менее, неизвестными остаются характерная длина для деформации кручения l_t и полярное соотношение ψ , значения которых отсутствуют в справочниках, и которые не могут быть найдены из сравнения полученного в главе 2 решения с экспериментальными данными. Проанализируем качественное влияние этих параметров на характеристики процесса диффузии.

Из равенства нулю микроповоротов вокруг $\mathbf{e}_r$ следует независимость ненулевых компонент тензора моментных напряжений от ψ (см. соотношения (3.2.36)). В результате, плотность энергии упругой деформации и химический потенциал не зависят от полярного соотношения:

$$\begin{aligned}
W = W^{MP} = & \frac{\lambda}{2} \left(\varepsilon_{zz} + \frac{\partial u_r}{\partial r} + \frac{u_r}{r} \right)^2 + \mu \left(\frac{u_r}{r} \right)^2 + \mu \left(\frac{\partial u_r}{\partial r} \right)^2 + \mu (\varepsilon_{zz})^2 + \\
& + \frac{\mu}{2N^2} \left(\frac{\partial u_z}{\partial r} \right)^2 + 2\mu l_b^2 \left[\left(\frac{\partial \theta_\varphi}{\partial r} \right)^2 + \left(\frac{\theta_\varphi}{r} \right)^2 \right] - 2\mu (l_t^2 - 2l_b^2) \frac{\theta_\varphi}{r} \frac{\partial \theta_\varphi}{\partial r} - \quad (3.2.42) \\
& - (3\lambda + 2\mu) \alpha \operatorname{tr} \left(\varepsilon_{zz} + \frac{\partial u_r}{\partial r} + \frac{u_r}{r} \right) c + \frac{3}{2} (3\lambda + 2\mu) \alpha^2 c^2;
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\operatorname{tr} \Sigma = \operatorname{tr} \Sigma^{MP} = & \frac{\lambda}{2} \left(\varepsilon_{zz} + u'_r + \frac{u_r}{r} \right)^2 + \mu \left(\left(\frac{u_r}{r} \right)^2 + (u'_r)^2 + (\varepsilon_{zz})^2 \right) - \\
& - 2(3\lambda + 2\mu) \alpha \left(\varepsilon_{zz} + u'_r + \frac{u_r}{r} \right) c + \frac{9}{2} (3\lambda + 2\mu) \alpha^2 c^2 + \quad (3.2.43) \\
& + \mu \left(\frac{3}{2N^2} (u'_z)^2 + 2l_b^2 \left[(\theta'_\varphi)^2 + \left(\frac{\theta_\varphi}{r} \right)^2 \right] - 2(l_t^2 - 2l_b^2) \frac{\theta_\varphi}{r} \theta'_\varphi \right)
\end{aligned}$$

и, следовательно, ψ не влияет на процесс диффузии.

В главе 2 была показана справедливость следующего предположения:

$$\left(\frac{\theta_\varphi}{r}\right)^2 \ll \frac{\theta_\varphi \theta'_\varphi}{r} \ll (\theta'_\varphi)^2.$$

В результате, слагаемыми $(\theta_\varphi/r)^2$, $\theta'_\varphi \theta_\varphi/r$ в выражениях (3.2.42), (3.2.43) можно пренебречь, а значит, характерная длина для деформации кручения l_t не влияет на процесс диффузии.

Проанализируем теперь влияние параметров l_b и N с учетом экспоненциального характера убывания решения относительно u_z и θ_φ (показатель экспоненты пропорционален N/l_b). В выражении для энергии (3.2.42) появятся слагаемые типа $\exp(-2N(r_0 - r)/l_b)/l_b^2$. Тогда увеличение параметра N/l_b приводит к уменьшению области убывания плотности энергии упругой деформации. При этом увеличение l_b приводит к уменьшению абсолютного максимального значения энергии на границе (при некотором относительно большом значении характерной длины для деформации изгиба энергия сводится к выражению, определяемому в рамках классической теории). При определении же градиента химического потенциала слагаемые указанного типа умножаются на N/l_b . Увеличение данного отношения (как вследствие уменьшения l_b , так и вследствие увеличения N) увеличивает максимальное значение градиента химического потенциала, при этом уменьшает область его затухания. Такое поведение должно приводить к более резкому изменению профиля концентрации вблизи поверхности.

3.2.3. Численный метод решения задачи массопругости в рамках микрополярной теории

Поскольку система уравнений (3.2.37)–(3.2.41) является частично связанной, при решении будем использовать результаты, полученные отдельно при

рассмотрении уравнений (3.2.37)–(3.2.39) и (3.2.40)–(3.2.41). Численный метод для решения системы уравнений (3.2.40)–(3.2.41) относительно $u_z(r)$, θ_φ был разработан в главе 2; численный метод для решения системы уравнений (3.2.37)–(3.2.39) относительно c , ε_{zz} , u_r был разработан в разделе 3.1 настоящей главы. При этом необходимо учесть, что в настоящем разделе термодинамическая сила/коэффициент диффузии зависят от решения системы (3.2.40)–(3.2.41).

Для решения задачи вновь вводится одномерная разностная сетка r_i . Радиальные и аксиальные перемещения, микроповорот вокруг $\mathbf{e}_\varphi$, а также концентрация задается в узлах сетки; компоненты тензоров силовых и моментных напряжений, а также поток и коэффициент диффузии задаются в ячейках сетки (интервалах между узлами). Используется неявная численная схема.

До первого шага по времени определяются узловые переменные u_{z_i} и θ_{φ_i} (см. главу 2). Эти переменные не меняются с течением времени. Далее в начале нового шага по времени определяется коэффициент $D_{i+1/2}^{n+1}$ и термодинамическая сила $F_{i+1/2}^{n+1}$. Для краткости записи номер нового шага по времени $(n+1)$ будет в дальнейшем опускаться.

При вычислении коэффициента диффузии $D = D(W)$ и термодинамической силы $F = F((\text{tr}\Sigma)')$ сначала необходимо аппроксимировать плотность

энергии упругой деформации, которая, в свою очередь, задается в ячейках:

$$\begin{aligned}
W_{i+\frac{1}{2}} = & \frac{\lambda}{2} \left(\varepsilon_{zz}^n + \frac{u_{r_{i+1}}^n - u_{r_i}^n}{\Delta r_i} + \frac{u_{r_{i+1}}^n + u_{r_i}^n}{2r_{i+\frac{1}{2}}} \right)^2 + \\
& + \mu \left(\left(\frac{u_{r_{i+1}}^n + u_{r_i}^n}{2r_{i+\frac{1}{2}}} \right)^2 + \left(\frac{u_{r_{i+1}}^n - u_{r_i}^n}{\Delta r_i} \right)^2 + (\varepsilon_{zz}^n)^2 \right) + \\
& + \frac{\mu}{2N^2} \left(\frac{u_{z_{i+1}}^n - u_{z_i}^n}{\Delta r_i} \right)^2 + 2\mu l_b^2 \left[\left(\frac{\theta_{\varphi_{i+1}}^n - \theta_{\varphi_i}^n}{\Delta r_i} \right)^2 + \left(\frac{\theta_{\varphi_{i+1}}^n + \theta_{\varphi_i}^n}{2r_{i+\frac{1}{2}}} \right)^2 \right] - \\
& - 2\mu (l_t^2 - 2l_b^2) \frac{\theta_{\varphi_{i+1}}^n + \theta_{\varphi_i}^n}{2r_{i+\frac{1}{2}}} \frac{\theta_{\varphi_{i+1}}^n - \theta_{\varphi_i}^n}{\Delta r_i} - \\
& - (3\lambda + 2\mu) \bar{\alpha} \text{tr} \left(\varepsilon_{zz}^n + \frac{u_{r_{i+1}}^n - u_{r_i}^n}{\Delta r_i} + \frac{u_{r_{i+1}}^n + u_{r_i}^n}{2r_{i+\frac{1}{2}}} \right) \frac{c_{i+1}^n + c_i^n}{2} + \\
& \frac{3}{2} (3\lambda + 2\mu) \bar{\alpha}^2 \left(\frac{c_{i+1}^n + c_i^n}{2} \right)^2.
\end{aligned} \tag{3.2.44}$$

Градиент термодинамической силы аппроксимируется следующим образом:

$$F_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{\Delta r_i} \frac{W_{i+1+\frac{1}{2}} - W_{i-\frac{1}{2}}}{2}. \tag{3.2.45}$$

Далее определяются поочередно переменные c_i , ε_{zz} и u_{r_i} (см. раздел 3.1).

3.2.4. Влияние напряженно-деформированного состояния

Моделируется проведенный в [47, 137] эксперимент по искусственному насыщению стандартных цилиндрических образцов радиусом 4 мм и длиной 40 мм, изготовленных из атмосферостойкой стали 14ХГНДЦ (молярная масса стали составляет 0.056 кг/моль, плотность $\rho_S = 7800$ кг/м³, модуль сдвига $\mu = 80$ ГПа, коэффициент Пуассона $\nu = 0.3$). Стальные образцы выдерживались в течение 96 часов в деаэрированном водном растворе 5% по массе NaCl и 0.5 % по массе CH₃COOH (опыт проводили при комнатной температуре). В процессе тестирования в растворе создавалась и поддерживалась

концентрация 2500 мг/л H_2S методом барботирования газообразным сероводородом. Согласно [137], 2500 мг/л сероводорода на границе соответствует концентрации 50 млн⁻¹ по массе; молярная масса водорода составляет 0.002 кг/моль.

Измерения концентрации водорода (по массе) осуществлялись с помощью промышленного масс-спектрометрического анализатора водорода АВ-1 [132], работа которого основана на методе высокотемпературной вакуумной экстракции. Перед измерением концентрации насыщенные образцы разрезались на четыре равные части, с трех из которых срезались слои толщиной соответственно 60, 110 и 210 мкм. Средние значения концентрации водорода в образцах с исходной толщиной и с удаленными поверхностными слоями, измеренные в [47, 137], приведены в Таблице 3.1.

Таблица 3.1. Концентрация водорода по массе

Радиус образца, мм	c_{total} , млн ⁻¹	c_{ppm} , млн ⁻¹
4.00	1.090	0.620
3.94	0.610	0.140
3.89	0.471	0.001
3.79	0.475	0.005

Известно, что ненасыщенные искусственно (или в агрессивной среде) изделия содержат равномерно распределенный “исходный” водород, источниками которого в металлах являются водородосодержащие среды (вода, масло), используемые в производстве металлов, а также воздушная атмосфера. Согласно данным, представленным во втором столбце Таблицы 3.1, общее количество водорода c_{total} , извлекаемое из частей цилиндрического образца с удаленными слоями толщиной 110 мкм ($R = 3.89$ мм) и 210 мкм ($R = 3.79$ мм), почти одинаково. На основании этого положим “исходную” массовую концентрацию водорода равной 0.470 млн⁻¹. Тогда концентрация водорода, проникшего в материал непосредственно при искусственном насыщении, определяется как $c_{\text{ppm}} = c_{\text{total}} - 0.470$; соответствующие данные представлены

в последнем столбце Таблицы 3.1. Согласно этим данным, слой толщиной 110 мкм содержит весь водород ($m_H/m_S = 0.62$ млн⁻¹, $m_H = 0.0097$ мг), а слой толщиной 60 мкм содержит около 77% этого количества ($m_H/m_S = 0.48$ млн⁻¹, $m_H = 0.0075$ мг). При этом распределение водорода по слою 60 мкм неизвестно из эксперимента.

Основываясь на изложенных ранее в диссертационной работе доводах, положим параметр асимметрии $N = 0.99$, характерную длину для деформации изгиба $l_b = 6$ мкм и $l_b = 13$ мкм. Характерная длина для деформации кручения должна удовлетворять условиям $0 \leq l_t^2 \leq 4l_b^2$ ($-\beta_3 \leq \beta_2 \leq \beta_3$), чтобы гарантировать положительность плотности энергии упругой деформации. Поскольку, согласно проведенному в разделе 3.2.2 анализу, значение характерной длины для деформации кручения не оказывает значительного влияния на концентрационный профиль, положим $l_t = 2l_b$ ($\beta_2 = \beta_3$). Распределенный момент на границе принимается равным $M_0 = -100$ кПа·м.

Деформация насыщаемого материала, вызванная накоплением водорода, может достигать нескольких процентов, что позволяет оценить величину коэффициента линейного концентрационного расширения. Примем для определенности $\bar{\alpha} = 1.5e - 6$. В справочниках и в литературе представлен широкий диапазон значений коэффициента диффузии водорода в стали. При этом он зависит от энергии связи водорода в соответствии с законом Аррениуса [39], который не вводится дополнительно в предложенную в диссертационной работе модель. Примем для определенности $D_0 = 5e - 16$ м²/с. Обратим внимание на то, что исследование влияния коэффициента диффузии и коэффициента линейного концентрационного расширения на концентрационные профили не является одной из задач работы.

Представленные на Рис. 3.7 концентрационные профили построены на основании решения следующих задач:

- 1) Задача диффузии с учетом влияния напряженно-деформированного со-

стояния через химический потенциал, определенный в рамках микрополярной теории упругости ($\mu_S = \mu_S^{\text{micropolar}}$).

- 2) Задача диффузии с учетом влияния напряженно-деформированного состояния через химический потенциал, определенный в рамках классической теории упругости ($\mu_S = \mu_S^{\text{classical}}$).
- 3) Задача диффузии с учетом влияния напряженно-деформированного состояния через зависимость коэффициента диффузии от плотности энергии упругой деформации микрополярной среды ($D = D(W^{\text{micropolar}})$).
- 4) Задача диффузии с учетом влияния напряженно-деформированного состояния через зависимость коэффициента диффузии от плотности энергии упругой деформации классической среды ($D = D(W^{\text{classical}})$).
- 5) Задача диффузии без учета влияния напряженно-деформированного состояния: поток определяется в соответствии с классическим законом Фика ($\mu_S = 0, D = D_0$).

Профили (при $l_b = 13$ мкм) описывают распределение концентрации через 96 часов насыщения.

Во всех перечисленных случаях толщина насыщенного поверхностного слоя меньше 60 мкм, что удовлетворяет экспериментальным данным. Сравнение концентрационных профилей, построенных при решении задач 1–4, с концентрационным профилем, построенным при решении задачи 5, позволяет оценить влияние внутренних напряжений и деформаций на концентрацию диффундирующего вещества. Видно, что учет такого влияния приводит к большей насыщаемости поверхностного слоя и, соответственно, к большему локальному увеличению концентрации. При этом учет зависимости коэффициента диффузии от энергии упругой деформации классической среды (задача 4) практически совпадает с результатом, полученным без учета влияния

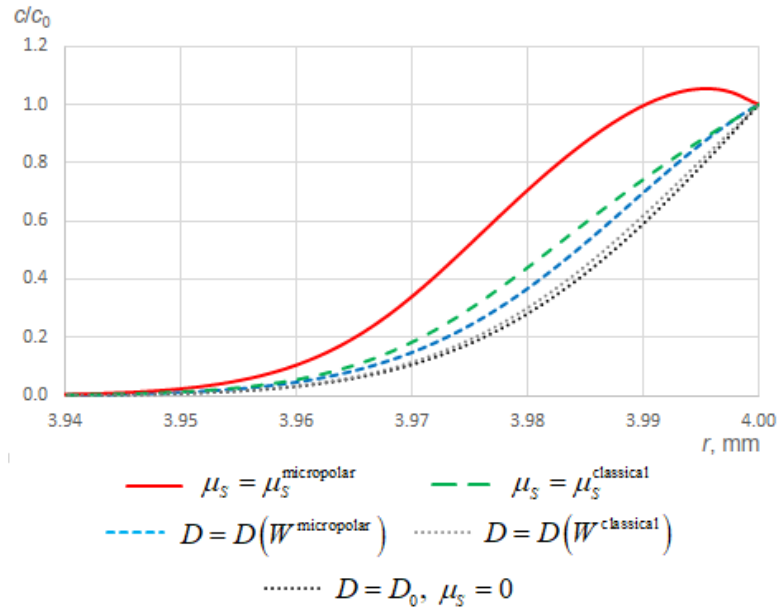


Рис. 3.7. Концентрационные профили через 96 часов насыщения; $l_b = 13$ мкм

напряжений и деформаций на процесс диффузии (задача 5), ввиду малости энергии. Сравнение концентрационных профилей, построенных при решении задач 1 и 2, а также 3 и 4 позволяет оценить вклад моментных взаимодействий между частицами среды на содержание и распределение диффундирующего вещества. Видно, что при обоих способах учета влияния напряженно-деформированного состояния на процесс диффузии (через дополнительную термодинамическую силу, пропорциональную градиенту химического потенциала и через зависимость коэффициента диффузии от энергетических характеристик системы), учет моментных взаимодействий увеличивает насыщенность приповерхностной области и, соответственно, локальную концентрацию примеси.

Обратим внимание на особенность концентрационного профиля, построенного при решении задачи 1: наличие “горба”, вызванного тем, что относительная концентрация водорода (концентрация, отнесенная к концентрации, поддерживаемой на боковой поверхности) принимает максимальное значение на некотором расстоянии от границы. Такое распределение примеси объясняется тем, что диффузия вблизи поверхности обусловлена двумя причина-

ми: градиентом концентрации и градиентом химического потенциала. Градиент химического потенциала принимает большие значения непосредственно вблизи границы из-за резкого уменьшения напряжений и деформаций, вызванных распределенным моментом на боковой поверхности. В результате, влияние соответствующей термодинамической силы превалирует над влиянием перепада концентрации, и примесь диффундирует в области с меньшим напряженно-деформированным состоянием, даже когда концентрация в этой области больше. В итоге приповерхностная область насыщается все больше и больше в процессе диффузии. Вероятно, на практике водород будет стремиться не вглубь материала в область с менее напряженно-деформированным состоянием, а наружу. Учет такого поведения требует дальнейших исследований и выходит за рамки диссертационной работы. При этом обнаруженный эффект, вообще говоря, позволяет описать наблюдаемое экспериментально явление – наличие образованных водородом микротрещин вблизи поверхности на некотором удалении от нее, приводящих к появлению блистеров на поверхности [57, 59]. Помимо этого, в некоторых экспериментальных работах показано, что концентрация действительно может принимать максимальное значение не непосредственно на границе, а вблизи нее [113, 171].

В Таблице 3.2 приведены значения массы водорода m_H и среднее по поверхностному слою толщиной 60 мкм значение концентрации $\langle c \rangle_{hExp}$, соответствующие рассмотренным моделям (поскольку задачи 4 и 5 приводят к практически одинаковым количественным результатам, результаты задачи 4 отдельно не приводятся и могут считаться равными результатам задачи 5). Данные значения рассчитываются по следующим формулам:

$$m_H = 2\pi L \int_0^{r_0} \rho_H r dr = 2\pi L \rho_S \int_0^{r_0} c r dr, \quad \text{где} \quad c = \frac{\rho_H}{\rho_S}, \quad (3.2.46)$$

$$\langle c \rangle = \frac{2}{r_0^2 - R_*^2} \int_0^{r_0} c r dr = \frac{1}{r_0^2 - R_*^2} \frac{m_H}{\pi L \rho_S}, \quad (3.2.47)$$

где $r_0 - R_*$ – толщина слоя, по которому проводится осреднение (в данном случае $r_0 - R_* = 60$ мкм).

Таблица 3.2. Масса водорода m_H и средняя по 60 мкм концентрация водорода

Модель	m_H , мг	$\langle c \rangle_{hExp}$, млн ⁻¹
$\mu_S = \mu_S^{\text{micropolar}}$	0.0100	21
$\mu_S = \mu_S^{\text{classical}}$	0.0075	16
$D = D(W^{\text{micropolar}})$	0.0069	15
$\mu_S = 0, D = D_0$	0.0060	13

Видно, что все модели, учитывающие влияние напряженно-деформированного состояния, приводят к результатам, удовлетворяющим экспериментальным данным (измеренная экспериментально масса водорода в слое толщиной 60 мкм составляет 0.0075 мг, общая масса водорода – 0.0097 мг; средняя по 60 мкм концентрация водорода составляет 16 ppm). Отметим, что использование модели с $\mu_S = \mu_S^{\text{micropolar}}$ приводит к завышенным по сравнению с экспериментом данным. В то же время, такая модель позволяет описать локальное увеличение концентрации, которое может оказаться критическим. Для уточнения модели необходимо проведение дополнительных экспериментов, а также более точное определение неклассического граничного условия.

В основу рассматриваемых моделей положены различные механизмы влияния напряженно-деформированного состояния на процесс диффузии. В результате, локальное увеличение концентрации имеет различный характер. Для лучшего понимания качественных различий между моделями сравним результаты, полученные при одном и том же суммарном количестве водорода, которое примем равным экспериментальному значению по слою в 60 мкм ($m_S = 0.0075$ мг). Такая насыщенность достигается при рассмотрении разных моделей за разное время. Результаты показаны на Рис. 3.8. При этом для более полноценного анализа моделей результаты построены при использовании двух значений характерной длины для деформации изгиба, определенных в главе 2: $l_b = 6$ мкм и $l_b = 13$ мкм. Соответствующие значения

времени насыщаемости (T_{lim}), толщины насыщенного слоя (h_{Theory}) и средней по толщине насыщенного слоя концентрации $\langle c \rangle_{h_{Theory}}$ приведены в Таблице 3.3. Вновь, поскольку задачи 4 и 5 приводят к практически одинаковым количественным результатам, результаты задачи 4 отдельно не приводятся и могут считаться равными результатам задачи 5.

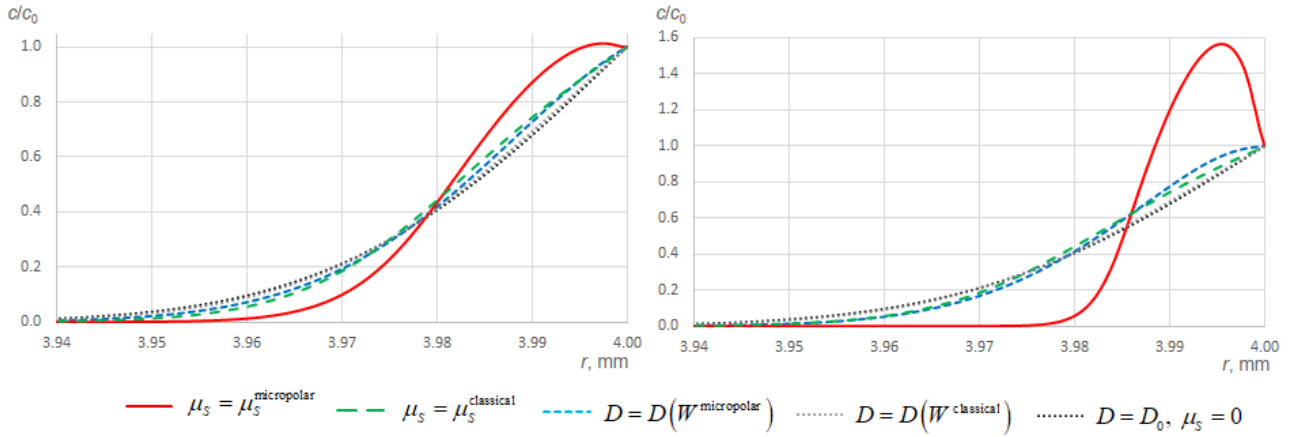


Рис. 3.8. Концентрационные профили при одинаковом значении концентрации водорода ($m_H = 0.0075$ мг) при $l_b = 13$ мкм (слева) и $l_b = 6$ мкм (справа)

Таблица 3.3. Масса водорода m_H и средняя по 60 мкм концентрация водорода

Модель	T_{lim} , ч	h_{Theory} , мкм	$\langle c \rangle_{h_{Theory}}$, млн ⁻¹
$\mu_S = 0, D = D_0$	161	58	33
$\mu_S = \mu_S^{classical}$	96	49	39
$l_b = 13$ мкм			
$\mu_S = \mu_S^{micropolar}$	53	39	49
$D = D(W^{micropolar})$	116	53	36
$l_b = 6$ мкм			
$\mu_S = \mu_S^{micropolar}$	2	22	85
$D = D(W^{micropolar})$	91	50	38

При меньшем значении характерной длины для деформации изгиба время насыщаемости материала до заданного значения меньше, при этом размер насыщенной области меньше, что приводит к большему локальному увеличению концентрации.

Перечислим основные качественные различия между моделями:

- 1) Модель диффузии, основанная на применении классического закона Фика (черная точечная линия) приводит к заданной насыщенности материала за более длительный промежуток времени, чем модели диффузии, учитывающие влияние напряженно-деформированного состояния. Толщина насыщенного слоя при этом больше, а локальное увеличение концентрации – меньше.
- 2) Модели, учитывающие моментные взаимодействия между частицами среды (красная сплошная линия и синяя пунктирная линия), всегда приводят к большему локальному увеличению концентрации непосредственно у боковой поверхности, чем классические модели (при сравнении моделей с $D = D(W^{\text{micropolar}})$ и с $\mu_S = \mu_S^{\text{classical}}$ большее локальное увеличение концентрации может наблюдаться в пределах буквально нескольких микрон).
- 3) В отличие от других моделей, модель с $\mu_S = \mu_S^{\text{micropolar}}$ может приводить к появлению “горба” на концентрационном профиле, при котором концентрация, нормированная на значение на границе, принимает максимальное значение на некотором расстоянии от поверхности порядка характерного размера неоднородности.
- 4) В отличие от других моделей, модель с $D = D(W^{\text{micropolar}})$ может приводить к появлению “ступеньки” на концентрационном профиле, при которой концентрация не меняется вблизи поверхности в области размером порядка характерного размера неоднородности и принимает максимальное значение ($c/c_0 = 1$).

Обсудим подробнее качественные различия между двумя факторами, влияющими на процесс диффузии: накоплением водорода в материале и распределенным моментом на боковой поверхности.

Накопление водорода приводит к появлению собственных деформаций и

внутреннего давления. В результате, насыщенная область материала испытывает сжимающие напряжения, а определяемая градиентом давления термодинамическая сила проталкивает примесь в растянутую область. Влияние водорода определяется величиной коэффициента линейного концентрационного расширения: уменьшение $\bar{\alpha}$ уменьшает влияние примеси на напряженно-деформированное состояние материала и, соответственно, на дополнительную термодинамическую силу. Понятно, что при рассмотрении моделей с градиентом химического потенциала, определенного в рамках классической теории, а также при рассмотрении модели с $D = D(W^{\text{classical}})$ уменьшение $\bar{\alpha}$ будет приводить к меньшей насыщаемости материала (при $\alpha = 0$ модели совпадут с моделью, основанной на применении классического закона Фика). Модель с $D(W^{\text{micropolar}})$ практически не зависит от значения $\bar{\alpha}$ в диапазоне $0-1.5e-6$, поскольку абсолютное значение плотности энергии упругой деформации определяется в основном микрополярным решением, а не решением задачи массопругости (это видно, например, из сравнения профилей, построенных при $D(W^{\text{micropolar}})$, $D(W^{\text{classical}})$ и $D = D_0$).

Исследуем модель с $\mu_S = \mu_S^{\text{micropolar}}$, в которой, в отличие от модели с $\mu_S = \mu_S^{\text{classical}}$, дополнительная термодинамическая сила вызвана как инициированным водородом давлением, так и решением микрополярной задачи при задании на боковой поверхности распределенного момента, а потому именно эта модель позволяет оценить различия между этими двумя причинами.

На Рис. 3.9 представлены концентрационные профили, построенные на базе модели с $\mu_S = \mu_S^{\text{micropolar}}$ при $\bar{\alpha} = 0$ и $\bar{\alpha} = 1.5e-6$; $l_b = 13$ мкм. Графики построены при одинаковом значении суммарной концентрации водорода ($m_H = 0.0075$ мг). Видно, что при отсутствии влияния водорода на напряженно-деформированное состояние материала концентрация увеличивается в области, характеризующейся сдвиговыми деформациями и касательными напряжениями, вызванными наличием на боковой поверхности распределен-

ного момента. В результате увеличивается локальная концентрация примеси непосредственно вблизи поверхности. Учет же влияния водорода приводит к перераспределению напряжений и уменьшает градиент химического потенциала непосредственно вблизи поверхности, в результате чего наблюдается меньшая разница в концентрации между соседними областями. Соответственно, насыщается больший слой, а локальная концентрация уменьшается.

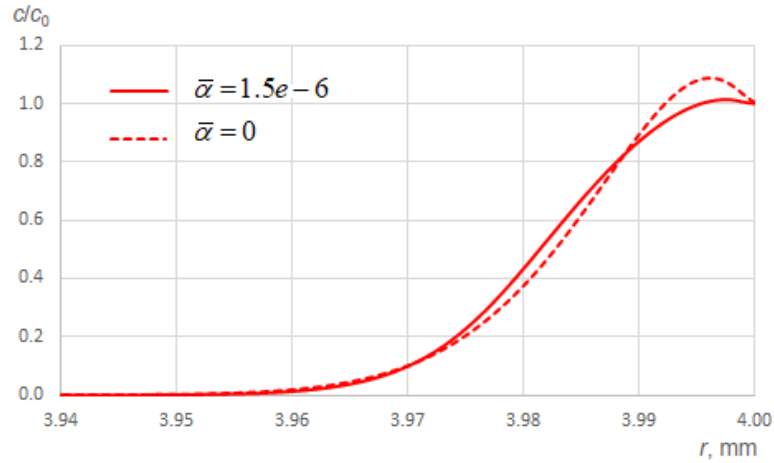


Рис. 3.9. Влияние накопления примеси на концентрационный профиль; $m_H = 0.0075$ мг, $l_b = 13$ мкм

Влияние распределенного момента на концентрационные профили показано на Рис. 3.10. Сравниваются результаты, полученные в рамках микрополярной теории при различных значениях M_0 при одной и той же суммарной концентрации ($m_H = 0.0075$ ву). Видно, что вне зависимости от способа учета влияния напряженно-деформированного состояния на процесс диффузии увеличение M_0 приводит к увеличению локальной концентрации примеси.

В завершение проанализируем влияние параметра асимметрии на концентрационные профили, построенные в рамках моделей микрополярной теории. Зафиксируем значение $l_b = 13$ мкм в модели с $\mu_S = \mu_S^{\text{micropolar}}$ и $l_b = 6$ мкм в модели с $D = D(W^{\text{micropolar}})$. Результаты, полученные через 96 часов насыщения, представлены на Рис. 3.11.

Видно качественное различие между результатами, полученными в рам-

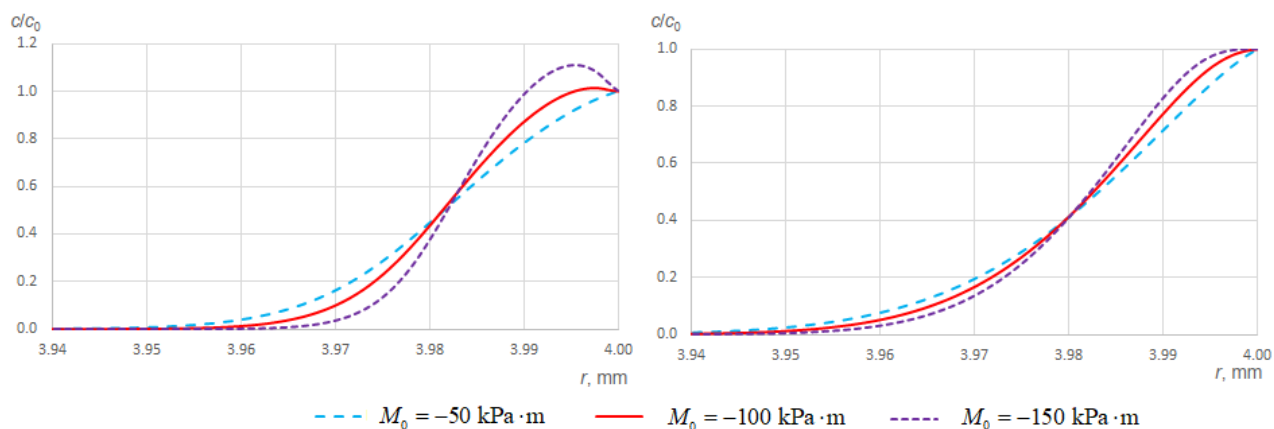


Рис. 3.10. Влияние распределенного момента на концентрационный профиль: $\mu_S = \mu_S^{\text{micropolar}}$ (слева), $D(W^{\text{micropolar}})$ (справа); $m_H = 0.0075$ мг, $l_b = 13$ мкм

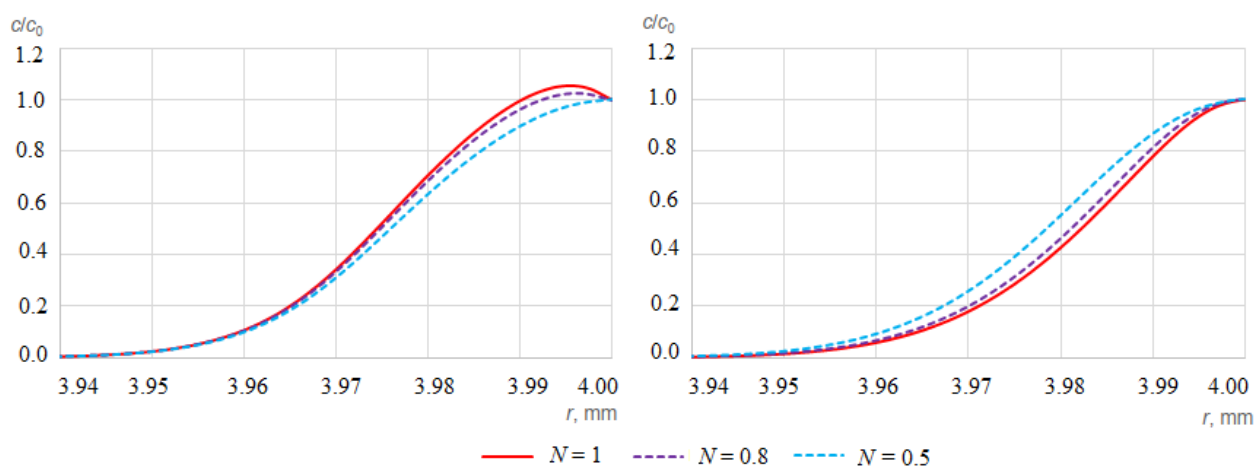


Рис. 3.11. Влияние параметра асимметрии на концентрационный профиль: $\mu_S = \mu_S^{\text{micropolar}}$ (слева), $D(W^{\text{micropolar}})$ (справа)

ках разных моделей. Так, в случае зависимости коэффициента диффузии от энергии уменьшение параметра асимметрии приводит к увеличению размеров насыщаемой области, что связано с увеличением области убывания плотности энергии упругой деформации. При этом при рассмотрении дополнительного потока, инициированного градиентом химического потенциала, максимальная насыщаемость материала уменьшается и наблюдается менее резкий перепад концентрации в приповерхностной области.

3.3. Основные результаты

- Разработаны модели диффузии с учетом влияния неоднородной микроструктуры деформируемого твердого тела в рамках микромеханики и в рамках микрополярной теории.
- Разработан численный метод для решения нелинейной связанной задачи об определении напряженно-деформированного состояния длинного цилиндра и распределения диффундирующего вещества с учетом неоднородной микроструктуры твердого тела.
- Решена задача массопругости для длинного цилиндра в рамках микрополярной теории упругости при задании на боковой поверхности распределенного момента, моделирующего взаимодействие зерен.
- Показано, что наличие пор может привести к значительному локальному увеличению концентрации диффундирующего вещества в упругом материале. При этом важен учет сегрегации, формы и ориентации пор.
- Показано, что при моделировании диффузии вблизи поверхности важно учитывать напряженно-деформированное состояние поверхностного слоя, вызванное моментным взаимодействием между частицами среды, которое может привести к существенному локальному увеличению концентрации.
- Описан поверхностный эффект при насыщении сталей водородом. Полученные результаты удовлетворяют экспериментальным данным качественно и количественно.

Заключение

В работе развиты методы механики сплошных сред, интегральным образом учитывающие влияние микроструктуры деформируемого твердого тела и происходящих на мезоуровне процессов на массоперенос. Проведен анализ влияния микроструктуры на такие характеристики процесса массопереноса, как коэффициент диффузии и связанные с напряженно-деформированным состоянием материала термодинамические силы, приводящие к возникновению дополнительных потоков диффундирующего вещества.

Получены следующие основные результаты:

- Методы гомогенизации обобщены для учета сегрегации при определении эффективных коэффициентов диффузии композита, состоящего из изотропной матрицы и изотропных неоднородностей с заданным распределением по ориентациям.
- Определены эффективные диффузионные свойства transversально-изотропного пористого материала, анизотропия которого обусловлена формой и ориентацией пор, с учетом эффекта сегрегации. Получена и проанализирована зависимость эффективных коэффициентов диффузии от параметра сегрегации, объемной доли пор, их формы и распределения по ориентациям.
- Для описания связанных со структурными особенностями материала поверхностных эффектов различной природы предложен подход, основанный на определении напряженно-деформированного состояния в рамках

микрополярной теории упругости. Поведение поверхностного слоя описано на примере длинного цилиндра.

- Разработаны модели диффузии с учетом влияния неоднородной микроструктуры деформируемого твердого тела в рамках микромеханики и в рамках микрополярной теории. Проведен анализ влияния неоднородной микроструктуры на распределение диффундирующего вещества, позволяющий описать локальное увеличение концентрации.
- Разработаны численные методы для решения в общем случае нелинейных связанных задач об определении напряженно-деформированного состояния длинного цилиндра и распределения диффундирующего вещества с учетом микроструктуры твердого тела в рамках микромеханики и в рамках микрополярной теории.
- Разработан подход для описания поверхностного эффекта при диффузии водорода в сталях, основанный на учете взаимодействия зерен посредством моментных взаимодействий между частицами микрополярной упругой среды.

Таким образом, учет микроструктуры реализован в рамках микромеханики и в рамках микрополярной теории. Применение двух подходов позволило описать ряд эффектов, возникающих при диффузии в материале со сложной структурой. В частности, описано локальное увеличение концентрации в областях материала, содержащих большое количество пор, а также локальное увеличение концентрации в поверхностном слое. При диффузии водорода такое локальное увеличение концентрации может привести к преждевременному выходу из строя готовой продукции, а потому корректное предсказание распределения диффундирующего вещества в твердом теле со сложной структурой позволит в перспективе предсказать сроки службы изделий и

конструкций, эксплуатируемых в агрессивных средах, и снизить риски возникновения аварий.

По результатам работы можно сделать следующие основные выводы. Во-первых, при определении эффективных коэффициентов диффузии гетерогенных материалов необходимо учитывать эффект сегрегации, поскольку увеличение скачка концентрации на границе раздела фаз композита приводит к изменению эффективного тензора диффузии. Во-вторых, при оценке распределения диффундирующего вещества в пористом материале необходимо учитывать параметр сегрегации, определяющий скачок концентрации на границе раздела фаз, объемную долю, форму и ориентацию пор в матрице. Неоднородное распределение пор, которое может наблюдаться, в частности, в поликристаллах с микротрещинами, может привести к существенному локальному увеличению концентрации. В-третьих, при моделировании диффузии вблизи поверхности необходимо учитывать напряжения и деформации в поверхностном слое, связанные с взаимодействием структурных неоднородностей, поскольку это приводит в конечном счете к существенному локальному увеличению концентрации в этой области. Взаимодействие структурных неоднородностей может успешно моделироваться моментными взаимодействиями между частицами среды на макроуровне. В частности, моделирование процесса диффузии в поликристаллах с учетом напряженно-деформированного состояния, определенного в рамках микрополярной теории, позволяет описать наблюдаемый экспериментально и не описанный известными моделями поверхностный эффект при насыщении стальных изделий водородом.

Литература

- [1] Беляев А. К., Кудинова Н. Р., Полянский В. А., Яковлев Ю. А. Описание деформации и разрушения материалов, содержащих водород, с помощью реологической модели // Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Сер.: Физико-математические науки. — 2015. — Т. 3, № 225. — С. 134–149.
- [2] Полянский А. М., Полянский В. А., Фролова К. П., Яковлев Ю. А. Водородная диагностика металлов и сплавов // Diagnostics, Resource and Mechanics of Materials and Structures. — 2018. — № 6. — С. 37–50.
- [3] Бокштейн Б. С., Магидсон И. А., Светлов И. Л. О диффузии в объеме по границам зерен // Физика Металлов и Металловедение. — 1958. — Т. 6, № 6. — С. 1040–1052.
- [4] Мясников В. П., Гузев М. А., Ушаков А. А. Структурное описание материалов // Изв.вузов. Сев.-Кавк.Регион. Естеств. науки. — 2003. — С. 256–265.
- [5] Тюменцев А. Н., Коротаев А. Д., Пинжин Ю. П. Высокодефектные структурные состояния, поля локальных внутренних напряжений и кооперативные механизмы мезоуровня деформации и переориентации кристалла в наноструктурных металлических материалах // Физическая мезомеханика. — 2004. — Vol. 7, no. 4. — P. 35–53.
- [6] Фролова К. П., Вильчевская Е. Н., Полянский В. А. Моделирование наводороженного поверхностного слоя в рамках теории микрополярных

- сред // Неделя науки СПбПУ. Материалы научной конференции с международным участием. — 2018. — С. 85–88.
- [7] Яковлев Ю. А., Третьяков Д. А., Фролова К. П. Водородная диагностика элементов конструкций и инженерных конструкций // Мехатроника, автоматика и робототехника. — 2019. — № 3. — С. 117–120.
- [8] Влияние пограничного слоя на распределение концентраций водорода при испытаниях сталей на стойкость к водородному растрескиванию / Е. Л. Алексеева, А. К. Беляев, А. С. Зегжда и др. // Diagnostics, Resource and Mechanics of Materials and Structures. — 2018. — № 3. — С. 43–57.
- [9] Аэро Э. Л., Кувшинский Е. В. Основные уравнения теории упругости сред с вращательным взаимодействием частиц // Физика твердого тела. — 1960. — Т. 2, № 7. — С. 1399–1409.
- [10] Кувшинский Е. В., Аэро Э. Л. Континуальная теория асимметрической упругости. Учет “внутреннего” вращения // Физика твердого тела. — 1963. — Т. 5, № 9. — С. 2591–2598.
- [11] Канаун С. К., Левин В. М. Метод эффективного поля в механике композитных материалов // Петрозаводск: Изд-во Петрозаводского гос. ун-та. — 1993.
- [12] Мясников В. П., Гузев М. А. Геометрическая модель внутренних самоуравновешенных напряжений в твердых телах // Докл. АН. — 2001. — Т. 380, № 5. — С. 1–3.
- [13] Панин В. Е., Панин А. В. Эффект поверхностного слоя в деформируемом твердом теле // Физическая мезомеханика. — 2005. — Vol. 8, no. 5. — P. 7–15.

- [14] Васильев В. В., Лурье С. А. Обобщенная теория упругости // Известия Российской академии наук. Механика твердого тела. — 2015. — Т. 4. — С. 16–27.
- [15] Индейцев Д. А., Мочалова Ю. А. Поверхностная диффузия водорода под действием динамических нагружений образца // Ученые записки Комсомольского-на-Амуре государственного технического университета. — 2018. — Т. 1, № 3. — С. 86–100.
- [16] Фролова К. П., Вильчевская Е. Н. Сравнение условий пластичности для микрополярных сред на примере модели цилиндрического образца // Diagnostics, Resource and Mechanics of Materials and Structures. — 2019. — № 5. — С. 6–22.
- [17] Савин Г. Н. Распределение напряжений около отверстий. — Киев: Наукова думка, 1968.
- [18] Лурье А. И. Теория упругости. — Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1970.
- [19] Савин Г. Н. Механика деформируемых тел. — Киев: Наукова думка, 1979.
- [20] Жилин П. А. Основные уравнения неклассической теории оболочек // Тр. Ленингр. политехн. ин-та. — 1982. — Т. 386. — С. 29–46.
- [21] Ерофеев В. И. Волновые процессы в твердых телах с микроструктурой. — М.: МГУ, 1999.
- [22] Князева А. Г. Диффузия и реология в локально-равновесной термодинамике // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. — 2005. — № 13. — С. 45–60.
- [23] Смолин И. Ю. Использование микрополярных моделей для описания пластического деформирования на мезоуровне // Вестник Пермского

национального исследовательского политехнического университета. Механика. — 2006. — Т. 14. — С. 189–205.

- [24] Качанов Л. М. Основы теории пластичности. — Рипол Классик, 2013.
- [25] Сердюков С. И. Уравнения тепло-и массопереноса высших порядков и их обоснование в расширенной неравновесной термодинамике // Теоретические основы химической технологии. — 2013. — Т. 47, № 2. — С. 122–122.
- [26] Фролова К. П. Определение эффективного модуля Юнга среды с микроструктурой, характерной для водородной деградации // Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Сер.: Физико-математические науки. — 2020. — Т. 13, № 2. — С. 160–174.
- [27] Фролова К. П. Соотношения между модулем Юнга и коэффициентом диффузии двухфазного материала // Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Сер.: Физико-математические науки. — 2021. — Т. 14, № 1. — С. 177–189.
- [28] Мейз Дж. Теория и задачи механики сплошных с. — 1974.
- [29] Кристенсен Р. Введение в механику композитов. — 1982.
- [30] Адамов А. А. О вычислительных эффектах при решении краевых задач для изотропного однородного континуума Коссера // Труды VI Российской научно-технической конференции “Механика микронеоднородных материалов и разрушение”. — 2010.

- [31] Adomeit G. Mechanics of Generalized Continua (Edited by E. Kroner), chapter Determination of elastic constants of a structured material. — IUTAM Symposia, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1968. — P. 80–82.
- [32] Aero E. L., Kuvshinskii E. V. Fundamental equations of the theory of elastic media with rotationally interacting particles // Sov. Phys. Solid State. — 1961. — Vol. 2, no. 7. — P. 1272–1281.
- [33] Aifantis E. C. On the microstructural origin of certain inelastic models // Journal of Engineering Materials and technology. — 1984. — Vol. 106, no. 4. — P. 326–330.
- [34] Aifantis E. C. Update on a class of gradient theories // Mechanics of materials. — 2003. — Vol. 35, no. 3–6. — P. 259–280.
- [35] Altenbach H., Eremeyev V. A. Generalized Continua—from the Theory to Engineering Applications. — Springer, 2012. — Vol. 541.
- [36] Anisimova M., Knyazeva A., Sevostianov I. Effective thermal properties of an aluminum matrix composite with coated diamond inhomogeneities // International Journal of Engineering Science. — 2016. — Vol. 106. — P. 142–154.
- [37] Anisimova M. A., Knyazeva A. G., Sevostianov I. Connection between diffusion coefficient and thermal conductivity of a metal matrix composite // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering / IOP Publishing. — Vol. 175. — 2017. — P. 012051.
- [38] Application of micropolar theory to the description of the skin effect due to hydrogen saturation / K. Frolova, E. Vilchevskaya, N. Bessonov et al. // Mathematics and Mechanics of Solids. — 2021. — P. 10812865211059223.

- [39] Arrhenius S. Über die Dissociationswärme und den Einfluss der Temperatur auf den Dissociationsgrad der Elektrolyte // Zeitschrift für physikalische Chemie. — 1889. — Vol. 4, no. 1. — P. 96–116.
- [40] Askar A., Cakmak A. S. A structural model of a micropolar continuum // International Journal of Engineering Science. — 1968. — Vol. 6, no. 10. — P. 583–589.
- [41] Atwood R. C., Sridhar S., Zhang W., Lee P. D. Diffusion-controlled growth of hydrogen pores in aluminium–silicon castings: in situ observation and modelling // Acta materialia. — 2000. — Vol. 48, no. 2. — P. 405–417.
- [42] Barrer RM. Diffusion and permeation in heterogeneous media // Diffusion in polymers. — 1968. — P. 165–217.
- [43] Belova I. V., Murch G. E. Calculation of the effective conductivity and diffusivity in composite solid electrolytes // Journal of Physics and Chemistry of Solids. — 2005. — Vol. 66, no. 5. — P. 722–728.
- [44] Benveniste Y. The effective mechanical behaviour of composite materials with imperfect contact between the constituents // Mechanics of Materials. — 1985. — Vol. 4, no. 2. — P. 197–2086.
- [45] Benveniste Y. A new approach to the application of Mori-Tanaka's theory in composite materials // Mechanics of materials. — 1987. — Vol. 6, no. 2. — P. 147–157.
- [46] Besdo D. Ein beitrag zur nichtlinearen theorie des Cosserat-kontinuums // Acta Mechanica. — 1974. — Vol. 20, no. 1. — P. 105–131.
- [47] Boundary layer influence on the distribution of hydrogen concentrations during hydrogen-induced cracking test of steels / E. L. Alekseeva, A. K. Belyaev,

- A. S. Zegzhda et al. // Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures. — 2018. — Vol. 3. — P. 43–57.
- [48] Brass A. M., Chanfreau A. Accelerated diffusion of hydrogen along grain boundaries in nickel // *Acta Materialia*. — 1996. — Vol. 44, no. 9. — P. 3823–3831.
- [49] Charging, degassing and distribution of hydrogen in cast iron / R. Wu, J. Ahlström, H. Magnusson et al. — Svensk kärnbränslehantering (SKB) Stockholm, 2015.
- [50] Christensen R. M., Lo K. H. Solutions for effective shear properties in three phase sphere and cylinder models // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. — 1979. — Vol. 27, no. 4. — P. 315–330.
- [51] Clausius R. Die mechanische behandlung der electricität. — Druck und Verlag von Friedrich Vieweg und Sohn, 1879. — Vol. 2.
- [52] Cosserat E., Cosserat F. Théorie des corps déformables. — A. Hermann et fils, 1909.
- [53] Cui Z., Gao F., Qu J. A finite deformation stress-dependent chemical potential and its applications to lithium ion batteries // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. — 2012. — Vol. 60, no. 7. — P. 1280–1295.
- [54] De Borst R. Simulation of strain localization: a reappraisal of the Cosserat continuum // *Engineering computations*. — 1991.
- [55] De Borst R. A generalisation of J2-flow theory for polar continua // *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. — 1993. — Vol. 103, no. 3. — P. 347–362.
- [56] Dell’Isola F., Corte A. D., Giorgio I. Higher-gradient continua: The legacy of Piola, Mindlin, Sedov and Toupin and some future research perspectives //

Mathematics and Mechanics of Solids. — 2017. — Vol. 22, no. 4. — P. 852–872.

- [57] Diehl D., Schneider E. L., Clarke T. G. R. Formation of hydrogen blisters during the solution treatment for aluminum alloys // *Tecnologia em Metalurgia, Materiais e Mineracao*. — 2021. — Vol. 18.
- [58] Dreyer W., Müller W. H. A study of the coarsening in tin/lead solders // *International Journal of solids and structures*. — 2000. — Vol. 37, no. 28. — P. 3841–3871.
- [59] Effect of fracture mode on acoustic emission behavior in the hydrogen embrittled low-alloy steel / E. D. Merson, P. N. Myagkikh, G. V. Klevtsov et al. // *Engineering Fracture Mechanics*. — 2019. — Vol. 210. — P. 342–357.
- [60] Effect of surface hydrogen concentration on hydrogen embrittlement properties of stainless steels and Ni based alloys / T. Omura, J. Nakamura, H. Hirata et al. // *ISI International*. — 2016. — Vol. 56, no. 3. — P. 405–412.
- [61] Effect of vanadium-alloying on hydrogen embrittlement of austenitic high-nitrogen steels / G. Maier, E. Astafurova, V. Moskvina et al. // *Procedia Structural Integrity*. — 2018. — Vol. 13. — P. 1053–1058.
- [62] Erbay H. A. An asymptotic theory of thin micropolar plates // *International journal of engineering science*. — 2000. — Vol. 38, no. 13. — P. 1497–1516.
- [63] Eremeyev V. A., Lebedev L. P., Altenbach H. *Foundations of micropolar mechanics*. — Springer Science & Business Media, 2012.
- [64] Eringen A. C. *Microcontinuum field theories: I Foundations and solids*. — New York : Springer Verlag, 1999.

- [65] Eringen A. C. Theory of micropolar elasticity // Microcontinuum field theories. — Springer, 1999. — P. 101–248.
- [66] Eshelby J. D. The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems // Proceedings of the royal society of London. Series A. Mathematical and physical sciences. — 1957. — Vol. 241, no. 1226. — P. 376–396.
- [67] Eshelby J. D. The elastic field outside an ellipsoidal inclusion // Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences. — 1959. — Vol. 252, no. 1271. — P. 561–569.
- [68] Eshelby J. D. The elastic energy-momentum tensor // Journal of elasticity. — 1975. — Vol. 5, no. 3. — P. 321–335.
- [69] Figueroa D., Robinson M. J. The effects of sacrificial coatings on hydrogen embrittlement and re-embrittlement of ultra high strength steels // Corrosion science. — 2008. — Vol. 50, no. 4. — P. 1066–1079.
- [70] Forest S., Sievert R. Elastoviscoplastic constitutive frameworks for generalized continua // Acta Mechanica. — 2003. — Vol. 160, no. 1. — P. 71–111.
- [71] Fricke H. A mathematical treatment of the electric conductivity and capacity of disperse systems I. The electric conductivity of a suspension of homogeneous spheroids // Physical Review. — 1924. — Vol. 24, no. 5. — P. 575.
- [72] Frolova K., Vilchevskaya E., Polyanskiy V., Alekseeva E. Modelling of a hydrogen saturated layer within the micropolar approach // New Achievements in Continuum Mechanics and Thermodynamics. — Springer, 2019. — P. 117–128.

- [73] Frolova K. P., Vilchevskaya E. N. Effective Diffusion Coefficient of a Porous Material Applied to the Problem of Hydrogen Damage // Advances in Hydrogen Embrittlement Study. — 2021. — P. 113–130.
- [74] Frolova K. P., Vilchevskaya E. N. Effective diffusivity of transversely isotropic material with embedded pores // Materials Physics & Mechanics. — 2021. — Vol. 47, no. 6.
- [75] Frolova K. P., Vilchevskaya E. N., Polyanskiy V. A., Yakovlev Yu. A. Modeling the skin effect associated with hydrogen accumulation by means of the micropolar continuum // Continuum Mechanics and Thermodynamics. — 2021. — Vol. 33, no. 3. — P. 697–711.
- [76] Gauthier R. D., Jahsman W. E. A quest for micropolar elastic constants // Journal of Applied Mechanics. — 1975. — Vol. 42. — P. 369–374.
- [77] Giorgio I., dell’Isola F., Misra A. Chirality in 2D Cosserat media related to stretch-micro-rotation coupling with links to granular micromechanics // International Journal of Solids and Structures. — 2020. — Vol. 202. — P. 28–38.
- [78] Goldstein R., Makhviladze T. Sarychev: Modeling the effect of mechanical stresses on the kinetics of the growth of oxygen precipitates in silicon // PNRPU Mech. Bull.(1). — 2010. — P. 35–49.
- [79] Grigoreva P., Vilchevskaya E., Polyanskiy V. The influence of elastic deformations in high-strength structural materials on the hydrogen transport // E3S Web of Conferences / EDP Sciences. — Vol. 225. — 2021. — P. 01010.
- [80] Hadam U., Zakroczymski T. Absorption of hydrogen in tensile strained iron and high-carbon steel studied by electrochemical permeation and desorption techniques // International Journal of Hydrogen Energy. — 2009. — Vol. 34, no. 5. — P. 2449–2459.

- [81] Haftbaradaran H., Song J., Curtin W. A., Gao H. Continuum and atomistic models of strongly coupled diffusion, stress, and solute concentration // Journal of Power Sources. — 2011. — Vol. 196, no. 1. — P. 361–370.
- [82] Hashin Z., Shtrikman S. A variational approach to the theory of the effective magnetic permeability of multiphase materials // Journal of applied Physics. — 1962. — Vol. 33, no. 10. — P. 3125–3131.
- [83] Hashin Z., Shtrikman S. A variational approach to the theory of the elastic behaviour of multiphase materials // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. — 1963. — Vol. 11, no. 2. — P. 127–140.
- [84] Hill R. Elastic properties of reinforced solids: some theoretical principles // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. — 1963. — Vol. 11, no. 5. — P. 357–372.
- [85] Indeitsev D., Mochalova Y. Mechanics of multi-component media with exchange of mass and non-classical supplies // Dynamics of Mechanical Systems with Variable Mass. — Springer, Vienna, 2014. — P. 165–194.
- [86] Kachanov M., Sevostianov I. Effective properties of heterogeneous materials. — Dordrecht : Springer, 2013.
- [87] Kachanov M., Sevostianov I. Micromechanics of materials, with applications. — Springer, 2018. — Vol. 249.
- [88] Kalnin J. R., Kotomin E. A., Maier J. Calculations of the effective diffusion coefficient for inhomogeneous media // Journal of physics and chemistry of solids. — 2002. — Vol. 63, no. 3. — P. 449–456.
- [89] Kanaun S. K. Approximation of a self-consistent field for the elastic composite medium // Zhurnal Prikladnoy Mekhaniki y Tekhnicheskoy Fisiki (J. Appl. Mech. Tech. Phys.)(2). — 1977. — P. 166–169.

- [90] Kanaun S. K., Jeulin D. Elastic properties of hybrid composites by the effective field approach // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. — 2001. — Vol. 49, no. 10. — P. 2339–2367.
- [91] Kanaun S. K., Levin V. Self-consistent methods for composites: Vol. 1: Static problems. — Springer Science & Business Media, 2007. — Vol. 148.
- [92] Kanaun S. K., Levin V. M. Effective field method in mechanics of matrix composite materials // Advances in mathematical modelling of composite materials. — World Scientific, 1994. — P. 1–58.
- [93] Kaur I., Mishin Yu., Gust W. Fundamentals of grain and interphase boundary diffusion. — John Wiley, 1995.
- [94] Kerner E. H. The elastic and thermo-elastic properties of composite media // Proceedings of the physical society. Section B. — 1956. — Vol. 69, no. 8. — P. 808.
- [95] Knyazeva A. G. Cross effects in solid media with diffusion // Journal of applied mechanics and technical physics. — 2003. — Vol. 44, no. 3. — P. 373–384.
- [96] Knyazeva A. G., Grabovetskaya G. P., Mishin I. P., Sevostianov I. On the micromechanical modelling of the effective diffusion coefficient of a polycrystalline material // Philosophical Magazine. — 2015. — Vol. 95, no. 19. — P. 2046–2066.
- [97] Koiter W. T. Couple-stresses in the theory of elasticity. Pt I–II // Proc. Koninkl. Neterland. Akad. Wetensh. — 1964. — Vol. B, no. 1. — P. 17–44.
- [98] Kröner E. On the physical reality of torque stresses in continuum mechanics // International Journal of Engineering Science. — 1963. — Vol. 1, no. 2. — P. 261–278.

- [99] Kunin I. A. Elastic media with microstructure. — Springer, 1983.
- [100] Lake R. Experimental methods for study of Cosserat elastic solids and other generalized elastic continua // Continuum models for materials with microstructure. — 1995. — P. 1–25.
- [101] Lake R. S. Size effects and micromechanics of a porous solid // Journal of Materials Science. — 1983. — Vol. 18, no. 9. — P. 2572–2580.
- [102] Larché F., Cahn J. W. A linear theory of thermochemical equilibrium of solids under stress // Acta metallurgica. — 1973. — Vol. 21, no. 8. — P. 1051–1063.
- [103] Larché F. C., Cahn J. W. Overview no. 41 the interactions of composition and stress in crystalline solids // Acta metallurgica. — 1985. — Vol. 33, no. 3. — P. 331–357.
- [104] Larché F. C., Cahn J. L. The effect of self-stress on diffusion in solids // Acta Metallurgica. — 1982. — Vol. 30, no. 10. — P. 1835–1845.
- [105] Lazar M., Kirchner H. O. K. The Eshelby stress tensor, angular momentum tensor and scaling flux in micropolar elasticity // International journal of solids and structures. — 2007. — Vol. 44, no. 14-15. — P. 4613–4620.
- [106] Levin V., Kanaun S., Markov M. Generalized Maxwell's scheme for homogenization of poroelastic composites // International Journal of Engineering Science. — 2012. — Vol. 61. — P. 75–86.
- [107] Levin V. M. Determination of elastic and thermoelastic constants of composite materials // Akademiia Nauk SSSR, Izvestiia, Mekhanika Tverdogo Tela. — 1976. — P. 137–145.
- [108] Li J. C. M., Oriani R. A., Darken L. S. Thermodynamics of stressed solids // Z. Phys. Chem.-Frankfurt. — 1966. — Vol. 49, no. 3–5. — P. 271.

- [109] Li K.-D., Chang E. A mechanism of porosity distribution in A356 aluminum alloy castings // *Materials Transactions*. — 2002. — Vol. 43, no. 7. — P. 1711–1715.
- [110] Liebold C., Müller W. H. Applications of higher-order continua to size effects in bending: Theory and recent experimental results // *Generalized Continua as Models for Classical and Advanced Materials*. — Springer, 2016. — P. 237–260.
- [111] Lippmann H. Cosserat plasticity and plastic spin. — 1995.
- [112] Markov K. Z. Elementary micromechanics of heterogeneous media // *Heterogeneous media*. — Springer, 2000. — P. 1–162.
- [113] Martinsson Å., Sandström R. Hydrogen depth profile in phosphorus-doped, oxygen-free copper after cathodic charging // *Journal of Materials Science*. — 2012. — Vol. 47, no. 19. — P. 6768–6776.
- [114] Maugin G. A., Metrikine A. V. *Mechanics of generalized continua*. — 2010.
- [115] Maxwell J. C. *A treatise on electricity and magnetism*. — Clarendon press, 1873. — Vol. 1.
- [116] Mazloun A., Kováčik J., Emmer Š., Sevostianov I. Copper–graphite composites: thermal expansion, thermal and electrical conductivities, and cross-property connections // *Journal of Materials Science*. — 2016. — Vol. 51, no. 17. — P. 7977–7990.
- [117] Mazloun A., Oddone V., Reich S., Sevostianov I. Connection between strength and thermal conductivity of metal matrix composites with uniform distribution of graphite flakes // *International journal of engineering science*. — 2019. — Vol. 139. — P. 70–82.

- [118] Mazloun A., Sevostianov I. Connections between anisotropic tensors of thermal conductivity and thermal expansion coefficients // International Journal of Engineering Science. — 2018. — Vol. 122. — P. 1–13.
- [119] McCartney L. N. Maxwell's far-field methodology predicting elastic properties of multiphase composites reinforced with aligned transversely isotropic spheroids // Philosophical Magazine. — 2010. — Vol. 90, no. 31-32. — P. 4175–4207.
- [120] McCartney L. N., Kelly A. Maxwell's far-field methodology applied to the prediction of properties of multi-phase isotropic particulate composites // Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences. — 2008. — Vol. 464, no. 2090. — P. 423–446.
- [121] Mehrer H. Diffusion in solids: fundamentals, methods, materials, diffusion-controlled processes. — Springer Science & Business Media, 2007. — Vol. 155.
- [122] Mikolaichuk M. A., Knyazeva A. G. Effect of stresses and strains on impurity redistribution in a plate under uniaxial loading // Journal of applied mechanics and technical physics. — 2010. — Vol. 51, no. 3. — P. 422–430.
- [123] Mindlin R. D. Influence of couple-stress on stress concentrations // Experimental Mechanics. — 1963. — Vol. 3, no. 1. — P. 1–7.
- [124] Mindlin R. D. Microstructure in linear elasticity // Arch. Rat. Mech. Anal. — 1964. — Vol. 16, no. 1. — P. 51–78.
- [125] Mindlin R. D. Second gradient of strain and surface-tension in linear elasticity // International Journal of Solids and Structures. — 1965. — Vol. 1, no. 4. — P. 417–438.

- [126] Mindlin R. D., Eshel N. N. On first strain-gradient theories in linear elasticity // International Journal of Solids and Structures. — 1968. — Vol. 4, no. 1. — P. 109–124.
- [127] Mindlin R. D., Tiersten H. F. Effects of couple-stresses in linear elasticity // Archive for Rational Mechanics and Analysis. — 1962. — Vol. 11. — P. 415–448.
- [128] Mishin Yu. M. 50 years of grain boundary diffusion: what do we know about it today? // Defect and Diffusion Forum / Trans Tech Publ. — Vol. 194. — 2001. — P. 1113–1126.
- [129] Mori T., Tanaka K. Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions // Acta metallurgica. — 1973. — Vol. 21, no. 5. — P. 571–574.
- [130] Mossotti O. F. Sur les forces qui régissent la constitution intérieure des corps: aperçu pour servir à la détermination de la cause et des lois de l'action moléculaire. — De l'Imprimerie royale, 1836.
- [131] Mühlhaus H.-B., Vardoulakis I. The thickness of shear bands in granular materials // Geotechnique. — 1987. — Vol. 37, no. 3. — P. 271–283.
- [132] Multichannel diffusion vs TDS model on example of energy spectra of bound hydrogen in $^{34}\text{CrNiMo6}$ steel after a typical heat treatment / A. K. Belyaev, A. M. Polyanskiy, V. A. Polyanskiy et al. // International journal of hydrogen energy. — 2016. — Vol. 41, no. 20. — P. 8627–8634.
- [133] Nowacki W. The linear theory of micropolar elasticity // Micropolar elasticity. — Springer, 1974. — P. 1–43.

- [134] Palmov V. A. Fundamental equations of the theory of asymmetric elasticity // Applied Mathematics and Mechanics. — 1964. — Vol. 28, no. 3. — P. 496–505.
- [135] Panin V. E., Elsukova T. F., Panin A. V., Kuzina O. Yu. Mesosubstructure in surface layers of cyclically loaded polycrystals and its role in fatigue failure // Doklady Physics / Springer. — Vol. 50. — 2005. — P. 360–365.
- [136] Perkins R. W., Thompson D. Experimental evidence of a couple-stress effect // AIAA Journal. — 1973. — Vol. 11, no. 7. — P. 1053–1055.
- [137] Phenomenon of skin effect in metals due to hydrogen absorption / V. A. Polyanskiy, A. K. Belyaev, E. L. Alekseeva et al. // Continuum Mechanics and Thermodynamics. — 2019. — Vol. 31, no. 6. — P. 1961–1975.
- [138] Polizzotto C. Unified thermodynamic framework for nonlocal/gradient continuum theories // European Journal of Mechanics-A/Solids. — 2003. — Vol. 22, no. 5. — P. 651–668.
- [139] Polyanskiy A. M., Polyanskiy V. A., Frolova K. P., Yakovlev Y. A. Vacuum vs argon technology for hydrogen measurement // Procedia Structural Integrity. — 2018. — Vol. 13. — P. 1408–1413.
- [140] Reuß A. Berechnung der fließgrenze von mischkristallen auf grund der plastizitätsbedingung für einkristalle. // ZAMM-Journal of Applied Mathematics and Mechanics/Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik. — 1929. — Vol. 9, no. 1. — P. 49–58.
- [141] Saenger E. H., Krüger O. S., Shapiro S. A. Effective elastic properties of randomly fractured soils: 3D numerical experiments // Geophysical Prospecting. — 2004. — Vol. 52, no. 3. — P. 183–195.

- [142] Salehi S. H., Salehi M. Numerical investigation of nanoindentation size effect using micropolar theory // *Acta Mechanica*. — 2014. — Vol. 225, no. 12. — P. 3365–3376.
- [143] Samarskii A. A. The theory of difference schemes. — CRC Press, 2001. — Vol. 240.
- [144] Sargsyan S. Asymptotically confirmed hypotheses method for the construction of micropolar and classical theories of elastic thin shells // *Advances in Pure Mathematics*. — 2015. — Vol. 5, no. 10. — P. 629.
- [145] Schijve J. Note on couple stresses // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. — 1966. — Vol. 14, no. 2. — P. 113–120.
- [146] Serebrinsky S., Carter E. A., Ortiz M. A quantum-mechanically informed continuum model of hydrogen embrittlement // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. — 2004. — Vol. 52, no. 10. — P. 2403–2430.
- [147] Sevostianov I. On the thermal expansion of composite materials and cross-property connection between thermal expansion and thermal conductivity // *Mechanics of Materials*. — 2012. — Vol. 45. — P. 20–33.
- [148] Sevostianov I. On the shape of effective inclusion in the Maxwell homogenization scheme for anisotropic elastic composites // *Mechanics of Materials*. — 2014. — Vol. 75. — P. 45–59.
- [149] Sevostianov I., Giraud A. Generalization of Maxwell homogenization scheme for elastic material containing inhomogeneities of diverse shape // *International Journal of Engineering Science*. — 2013. — Vol. 64. — P. 23–36.
- [150] Sevostianov I., Kachanov M. Compliance tensors of ellipsoidal inclusions // *International Journal of Fracture*. — 1999. — Vol. 96, no. 1. — P. 3–7.

- [151] Sevostianov I., Kachanov M. Explicit cross-property correlations for anisotropic two-phase composite materials // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. — 2002. — Vol. 50, no. 2. — P. 253–282.
- [152] Sevostianov I., Kachanov M. Connections between elastic and conductive properties of heterogeneous materials // Advances in applied mechanics. — Elsevier, 2009. — Vol. 42. — P. 69–252.
- [153] Sevostianov I., Levin V., Radi E. Effective properties of linear viscoelastic microcracked materials: Application of Maxwell homogenization scheme // Mechanics of Materials. — 2015. — Vol. 84. — P. 28–43.
- [154] Shewmon P. Diffusion in solids. — Springer, 2016.
- [155] Smith J. C. Simplification of van der Poel’s formula for the shear modulus of a particulate composite // Journal of Research of the National Bureau of Standards. Section A, Physics and Chemistry. — 1975. — Vol. 79, no. 2. — P. 419.
- [156] Sriraman K. R., Brahimi S., Szpunar J. A., Yue S. Hydrogen embrittlement of Zn-, Zn–Ni-, and Cd-coated high strength steel // journal of Applied Electrochemistry. — 2013. — Vol. 43, no. 4. — P. 441–451.
- [157] Stashchuk M. H. Mutual influence of the stress-strain state and hydrogen concentration in the metal–hydrogen system // Materials Science. — 2012. — Vol. 47, no. 4. — P. 499–508.
- [158] Steinmann P. A micropolar theory of finite deformation and finite rotation multiplicative elastoplasticity // International Journal of Solids and Structures. — 1994. — Vol. 31, no. 8. — P. 1063–1084.

- [159] Sun Y., Maciejewski K., Ghonem H. A damage-based cohesive zone model of intergranular crack growth in a nickel-based superalloy // International Journal of Damage Mechanics. — 2013. — Vol. 22, no. 6. — P. 905–923.
- [160] Surface vs diffusion in TDS of hydrogen / E. L. Alekseeva, A. K. Belyaev, A. M. Polyanskiy et al. // E3S Web of Conferences / EDP Sciences. — Vol. 121. — 2019. — P. 01012.
- [161] Sutardja P., Oldham W. G. Modeling of stress effects in silicon oxidation // IEEE Transactions on Electron Devices. — 1989. — Vol. 36, no. 11. — P. 2415–2421.
- [162] Toupin R. A. Elastic materials with couple-stresses // Archives for Rational Mechanics and Analysis. — 1962. — Vol. 11. — P. 385–414.
- [163] Toupin R. A. Theories of elasticity with couple-stress // Archives for Rational Mechanics and Analysis. — 1964. — Vol. 17. — P. 85–112.
- [164] The Use of Confocal Laser Scanning Microscopy for the 3D Quantitative Characterization of Fracture Surfaces and Cleavage Facets. / E. Merson, A. V. Kudrya, V. A. Trachenko et al. // Procedia Structural Integrity. — 2016. — Vol. 2. — P. 533–540.
- [165] Vardoulakis I. Shear-banding and liquefaction in granular materials on the basis of a Cosserat continuum theory // Ingenieur-Archiv. — 1989. — Vol. 59, no. 2. — P. 106–113.
- [166] Voight W. Theoretische studien uber die elasticitatsverhaltnisse des krys-talle, I, II. — Abh. Ges. Wiss., Gottingen., 1887.
- [167] Voigt W. Ueber die Beziehung zwischen den beiden Elasticitätsconstanten isotroper Körper // Annalen der physik. — 1889. — Vol. 274, no. 12. — P. 573–587.

- [168] Wasim M., Djukic M. B. Hydrogen embrittlement of low carbon structural steel at macro-, micro-and nano-levels // International Journal of Hydrogen Energy. — 2020. — Vol. 45, no. 3. — P. 2145–2156.
- [169] Wiener O. Die Theorie des Mischkorpers fur das Feld der stationaren Stromung // Abhandlungen der Sachsichen Gesellschaft der Akademischen Wissenschaften in Mathematik und Physik. — 1912. — Vol. 32. — P. 507–604.
- [170] Wu C. H. The role of Eshelby stress in composition-generated and stress-assisted diffusion // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. — 2001. — Vol. 49, no. 8. — P. 1771–1794.
- [171] Wu T. I., Wu J. C. Effects of cathodic charging and subsequent solution treating parameters on the hydrogen redistribution and surface hardening of Ti-6Al-4V alloy // Journal of alloys and compounds. — 2008. — Vol. 466, no. 1–2. — P. 153–159.
- [172] Yang J. F. C., Lakes R. S. Transient study of couple stress effects in compact bone: torsion // Journal of Biomechanical Engineering. — 1981. — Vol. 103, no. 4. — P. 275–279.
- [173] Zhang Y., Liu L. On diffusion in heterogeneous media // American Journal of Science. — 2012. — Vol. 312, no. 9. — P. 1028–10477.
- [174] Zubov L. M. Nonlinear theory of dislocations and disclinations in elastic bodies. — Berlin, Heidelberg, New-York et al : Springer-Verlag, 1997.