

DOI: 10.15593/perm.mech/2014.4.08

УДК 539.3

В.Е. ШавшуковПермский национальный исследовательский
политехнический университет, Пермь, Россия**УПРУГОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЗЕРЕН
В ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛАХ**

Предложен метод решения проблемы упругого взаимодействия зерен в поликристаллах на основе теоретико-полевого подхода. В уравнениях краевой задачи теории упругости неоднородного тела, записанных в интегральной форме, производится декомпозиция решения для деформаций в кристаллитах на две части: 1) нулевое решение, соответствующее формальному отсутствию межзеренного взаимодействия, 2) часть, отвечающая за это взаимодействие. Нулевое решение учитывает внутризеренное взаимодействие деформаций. Межзеренное взаимодействие рассматривается как возмущение нулевого решения, или малый параметр задачи. Представление точного решения в виде бесконечного ряда теории возмущений (в теоретико-полевой терминологии) преобразует интегральное уравнение исходной краевой задачи в бесконечную последовательность зацепляющихся систем интегральных уравнений для поправок различных порядков к нулевому решению. Математически это аналогично ситуации при построении решений уравнений в теории многих взаимодействующих частиц в статистической физике (цепочка уравнений Боголюбова для многочастичных функций распределения) и квантовой теории взаимодействующих полей (цепочка уравнений Дайсона-Швингера для функций Грина полей). Пренебрежение неоднородностями деформаций в пределах индивидуального зерна (при учете различия деформаций в разных зернах) сводит бесконечную цепочку систем интегральных уравнений к бесконечной цепочке зацепляющихся систем линейных алгебраических уравнений, которые могут быть решены современными численными методами. Коэффициенты систем линейных уравнений зависят от формы и взаимного расположения зерен, то есть определяются микроструктурой материала. Учитывается взаимодействие как с ближайшими соседними зернами, так и с более удаленными. Получены численные оценки влияния межзеренного взаимодействия на поля деформаций в приближении ближайших соседей, заимствованного из квантовой теории конденсированного состояния.

Ключевые слова: поликристаллы, упругое взаимодействие, краевые задачи для неоднородных сред

V.E. Shavshukov

Perm National Research Polytechnic University,
Perm, Russian Federation

ELASTIC INTERACTION OF GRAINS IN POLYCRYSTALLINE MATERIALS

The method of solution of the problem of elastic interaction of grains in polycrystals based on field theory approach is proposed. The solution of boundary value problem for strains in grains decomposed into two parts – zero order solution, which corresponds to formal absence of intergranular interactions, and the part which responds for this interaction. The zero order solution takes into account the intragrain interaction of strains. Intergranular interaction is considered as perturbation to zero order solution or small parameter of the task. Representation of the exact solution in the form of infinite series of perturbation theory (in field theory terminology) transforms the integral equation of initial boundary values problem into infinite consequence of interconnected systems of integral equations for corrections of different orders to zero order solution. From mathematical point of view it is analogous to situation in the theory of many interacting particles in statistical physics (the chain of Bogolubov equations for multi-particles distribution functions) and quantum theory of interacting fields (chain of Dyson-Schwinger equations for field Green's functions). The neglect of inhomogeneity of strains within individual grain (but taking into account the difference of strains in different grains) reduces the infinite consequence of integral equations to infinite chain of interconnected linear algebraic equations systems which can be solved by contemporary numerical procedures. Coefficients of linear equations depend on shape and positional relationship of the grains, id est they are determined by microstructure of material. Interaction with nearer and more remote grains is taken into account. The numerical evaluations for influence of intergranular interaction on deformation fields in the closest neighbours approximation, adopted from quantum condensed matter theory, are obtained.

Keywords: polycrystals, elastic interaction, boundary values problem for inhomogeneous media.

Введение

Поликристаллические материалы являются сложными иерархическими системами. Свойства поликристаллических тел в конечном счете определяются взаимодействием атомов, составляющих тело, и электронов внешних оболочек этих атомов. Это взаимодействие порождает все наблюдаемое разнообразие структур на масштабах от субатомных до макроскопических. На каждом масштабном уровне для описания свойств применимы разные физические законы и уравнения – от квантовой механики и теории квантованных полей до теории упругости однородных тел. Это составляет суть многоуровневого моделирования поведения материалов. Для количественного описания механического поведения поликристаллов во многих случаях достаточно рассмотрения на мезоуровне, когда принимается во внимание геометрическая структура и индивидуальные механические свойства зерен. Каждое отдельное зерно (кристаллит) рассматривается как однородное анизотропное тело.

тропное тело со свойствами монокристалла соответствующего вещества. Для поликристаллов мезомасштабный уровень рассмотрения развивается с начала XX века работами Фойгта [1] и Ройсса [2] по упругости поликристаллов. В подходе Фойгта игнорируется неоднородность деформаций, но учитывается неоднородность напряжений, обусловленная поворотом кристаллографических осей зерен-монокристаллов при переходе от одного зерна к другому. Впервые неоднородность деформаций в поликристаллическом теле была учтена И.М. Лифшицем и Л.Н. Розенцвейгом [3, 4]. Однако в этих работах анизотропия зерен принималась малой, и вычисления ограничивались первым порядком по степени анизотропии. Взаимодействием с соседними зернами также пренебрегалось. В дальнейшем, с развитием современных методов механики деформируемого твердого тела и появлением мощных компьютеров, сложились несколько направлений в мезомеханике поликристаллических материалов, которые явным или неявным образом учитывают упругое взаимодействие зерен. Наиболее употребительны три: метод прямого компьютерного моделирования, метод статистических моментов, феноменологические методы. Каждому из этих методов присущи достоинства и недостатки.

Метод прямого компьютерного моделирования заключается в построении конечноэлементных моделей реальных тел с точным описанием геометрической структуры компонентов материала, межфазных границ, распределения нагрузок и последующим численным решением краевых задач [5, 6, 7]. Гипотетически метод дает исчерпывающее описание механического поведения поликристалла, включая все эффекты межкристаллитного взаимодействия. Основной недостаток метода – ограниченность числа структурных компонентов (зерен) компьютерных моделей, как правило, не более нескольких тысяч.

В методе статистических моментов производится осреднение полей по представительному объему среды [8, 9, 10]. Практические возможности метода ограничены вычислением первых статистических моментов случайных полей – обычно средних значений и дисперсий, в редких случаях – моментов более высокого порядка. Однако первые статистические моменты дают весьма приблизительное представление о характере распределений случайных полей (полное описание случайной величины предусматривает знание функций распределения или, эквивалентно, всего бесконечного набора статистических момен-

тов). Но и при вычислении первых моментов требуется принятие различных упрощающих модельных представлений.

Феноменологический подход (в частности метод внутренних переменных) постулирует определяющие соотношения для материалов, содержащие неопределенные материальные функции или коэффициенты. Каждый из этих коэффициентов или функций отвечает за те или иные процессы или эффекты в материале. Эти коэффициенты определяются экспериментально. При этом значения материальных констант, как правило, справедливы в узких диапазонах условий нагружения, температур и т.д., что увеличивает объем необходимых экспериментов. Феноменологический подход наиболее широко применяется в теории пластичности и других теориях неупругого деформирования [11, 12].

В настоящей работе предложен метод вычисления случайных полей деформаций в поликристалле, преодолевающий многие ограничения упомянутых выше методов.

1. Краевая задача теории упругости для поликристаллического тела в теоретико-полевой формулировке

Ограничимся рассмотрением нетекстурированных однофазных поликристаллов, состоящих из кристаллитов (зерен) одного типа. Оси упругой симметрии кристаллитов хаотически ориентированы в пространстве и для разных кристаллитов никак не коррелируют друг с другом. С точки зрения механики деформируемого твердого тела поликристаллический агрегат представляет собой многосвязную область объемом Ω с внешней поверхностью Γ , состоящей из подобластей (кристаллитов) с объемами ω_ξ и границами Γ_ξ , $\Omega = \sum_{\xi=1}^N \omega_\xi$, индекс ξ нумерует кристаллиты; N – полное число кристаллитов в теле (макроскопически большое число); по границам Γ_ξ обеспечивается прочное сцепление кристаллитов.

В пределах каждого кристаллита материал однороден, упругие свойства кристаллита описываются постоянным тензором C_{ijmn}^0 в кристаллографической системе координат (с осями, параллельными осям упругой симметрии кристаллита). В глобальной (лабораторной) системе координат тензор модулей упругости отдельного кристаллита

$$C_{ijmn}^{(\xi)}(\vec{r}) = \alpha_{ip}^{(\xi)}(\vec{r})\alpha_{jq}^{(\xi)}(\vec{r})\alpha_{mr}^{(\xi)}(\vec{r})\alpha_{ns}^{(\xi)}(\vec{r})C_{pqrs}^0, \quad (1)$$

где $\alpha_{ip}^{(\xi)}(\vec{r})$ – направляющие косинусы осей лабораторной системы координат относительно кристаллографической системы координат ξ -го кристаллита.

Тензор модулей упругости поликристаллической среды имеет вид

$$C_{ijmn}(\vec{r}) = \sum_{\xi=1}^N \lambda_{\xi}(\vec{r})C_{ijmn}^{(\xi)}(\vec{r}), \quad (2)$$

где $\lambda_{\xi}(\vec{r})$ – индикаторная функция ξ -го кристаллита,

$$\lambda_{\xi}(\vec{r}) = \begin{cases} 1, & \text{если } \vec{r} \in \omega_{\xi} \text{ (}\xi\text{-му кристаллиту),} \\ 0, & \text{в других случаях.} \end{cases}$$

Уравнение для тензора деформаций краевой задачи теории упругости неоднородного макроскопически изотропного тела в интегральной форме имеет вид [10]

$$\varepsilon_{ij}(\vec{r}) = \varepsilon_{ij}^* + \int_V d\vec{r}_1 g_{ijkl}(\vec{r} - \vec{r}_1) C'_{klmn}(\vec{r}_1) \varepsilon_{mn}(\vec{r}_1), \quad (3)$$

где $g_{ijkl} = \frac{1}{2}(G_{ik,jl} + G_{jk,il})$ – симметризованный тензор Грина, а $G_{ik,jl}$ – вторая производная тензора Грина краевой задачи теории упругости однородной среды с осредненным тензором модулей упругости; $C'_{klmn}(\vec{r}) \equiv C_{klmn}(\vec{r}) - \langle C_{klmn} \rangle$ – флуктуации тензора модулей упругости относительно осредненного тензора $\langle C_{ijkl} \rangle = \frac{1}{V} \int_V C_{ijkl}(\vec{r}) d\vec{r} = 3\langle K \rangle \cdot V_{ijkl} + 2\langle \mu \rangle \cdot D_{ijkl}$ ($\langle K \rangle$ и $\langle \mu \rangle$ – осредненный объемный модуль и модуль сдвига; V_{ijkl} и D_{ijkl} – шаровая и девиаторные части единичного симметричного тензора 4-го ранга); ε_{ij}^* – макроскопическая однородная деформация тела. Используя известные выражения для $G_{ik,jl}$ [10], получим тензор g_{ijkl} , имеющий следующий вид:

$$g_{ijkl}(\vec{r}) = -\frac{1}{3\langle \mu \rangle} \left[(1 - \chi) V_{ijkl} + \left(1 - \frac{2}{5} \chi \right) D_{ijkl} \right] \delta(\vec{r}) + f_{ijkl}(\vec{r}), \quad (4)$$

где $\chi = \frac{3\langle K \rangle + \langle \mu \rangle}{3\langle K \rangle + 4\langle \mu \rangle}$ – материальный параметр, а тензор-функция $f_{ijkl}(\vec{r})$ зависит от \vec{r} следующим образом:

$$f_{ijkl}(\vec{r}) = \frac{1}{8\pi\langle \mu \rangle |\vec{r}|^3} \left[3(n_i n_l \delta_{jk} + n_j n_l \delta_{ik}) - 2I_{ijkl} + \chi(I_{ijkl} + I_{ikjl} + I_{iljk}) - \right. \\ \left. - 3\chi(n_i n_j \delta_{kl} + n_i n_k \delta_{jl} + n_i n_l \delta_{jk} + n_j n_k \delta_{il} + n_j n_l \delta_{ik} + n_k n_l \delta_{ij} - 5n_i n_j n_k n_l) \right], \quad (5)$$

где δ_{ij} – символ Кронекера; $I_{ijkl} = \frac{1}{2}(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk})$; $n_i = \frac{x_i}{|\vec{r}|}$ – направляющие косинусы радиуса-вектора \vec{r} в глобальной системе координат.

Представим глобальные тензоры деформаций и напряжений ε_{ij} и σ_{ij} в виде сумм деформаций и напряжений в кристаллите $\varepsilon_{ij}^{(\xi)}$ и $\sigma_{ij}^{(\xi)}$ с помощью индикаторных функций

$$\varepsilon_{ij}(\vec{r}) = \sum_{\xi=1}^N \lambda_{\xi}(\vec{r}) \varepsilon_{ij}^{(\xi)}(\vec{r}), \quad \sigma_{ij}(\vec{r}) = \sum_{\xi=1}^N \lambda_{\xi}(\vec{r}) \sigma_{ij}^{(\xi)}(\vec{r}). \quad (6)$$

Для поликристаллов с тензором модулей упругости (2) интегральное уравнение для деформаций (3) удобно переписать в виде, аналогичном уравнению для амплитуды рассеяния частиц на силовых центрах в квантовой теории поля [13]:

$$\varepsilon_{ij}^{(\xi)}(\vec{r}_{\xi}) = \varepsilon_{ij}^* + \int_{\omega_{\xi}} d\vec{r}'_{\xi} g_{ijkl}(\vec{r}_{\xi} - \vec{r}'_{\xi}) \left[(C_{klmn}^{(\xi)}(\vec{r}'_{\xi}) - \langle C_{klmn} \rangle) \right] \varepsilon_{mn}^{(\xi)}(\vec{r}'_{\xi}) + \\ + \sum_{\eta \neq \xi} \int_{\omega_{\eta}} d\vec{r}'_{\eta} g_{ijkl}(\vec{r}_{\xi} - \vec{r}'_{\eta}) \left[(C_{klmn}^{(\eta)}(\vec{r}'_{\eta}) - \langle C_{klmn} \rangle) \right] \varepsilon_{mn}^{(\eta)}(\vec{r}'_{\eta}), \quad (7)$$

где $\vec{r}_{\xi} = \vec{r} \in \omega_{\xi}$, $\xi = 1, 2, \dots, N$. Выражение (7) есть система N интегральных уравнений для N неизвестных функций $\varepsilon_{ij}^{(\xi)}(\vec{r})$.

Пользуясь теоретико-полевой терминологией, можно сказать, что деформация $\varepsilon_{ij}^{(\xi)}(\vec{r}_{\xi})$ в каждом отдельном кристаллите есть амплитуда рассеяния однородной макродеформации ε_{ij}^* на неоднородностях среды $(C_{klmn}^{(\xi)}(\vec{r}_{\xi}) - \langle C_{klmn} \rangle)$, выступающих здесь аналогом потенциала рассеивающих центров, а уравнение (7) означает, что точное значение де-

формации в ξ -м кристаллите определяется многократным рассеянием макродеформации ε_{ij}^* на упругой неоднородности этого кристаллита (второй член в правой части уравнения) и на всех остальных (третий член).

Сумма $\sum_{\eta \neq \xi} \int_{\omega_\eta} d\vec{r}'_\eta g_{ijkl}(\vec{r}_\xi - \vec{r}'_\eta) \left[(C_{klmn}^{(\eta)}(\vec{r}'_\eta) - \langle C_{klmn} \rangle) \right] \varepsilon_{mn}^{(\eta)}(\vec{r}'_\eta)$ в (7) описы-

вает межкристаллитное взаимодействие деформаций. Во всех членах этой суммы в тензоре Грина g_{ijkl} исчезает δ -функция, и уравнение (7) принимает вид

$$\begin{aligned} \varepsilon_{ij}^{(\xi)}(\vec{r}_\xi) = & \varepsilon_{ij}^* + \int_{\omega_\xi} d\vec{r}'_\xi g_{ijkl}(\vec{r}_\xi - \vec{r}'_\xi) \left[(C_{klmn}^{(\xi)}(\vec{r}'_\xi) - \langle C_{klmn} \rangle) \right] \varepsilon_{mn}^{(\xi)}(\vec{r}'_\xi) + \\ & + \sum_{\eta \neq \xi} \int_{\omega_\eta} d\vec{r}'_\eta f_{ijkl}(\vec{r}_\xi - \vec{r}'_\eta) \left[(C_{klmn}^{(\eta)}(\vec{r}'_\eta) - \langle C_{klmn} \rangle) \right] \varepsilon_{mn}^{(\eta)}(\vec{r}'_\eta), \end{aligned} \quad (8)$$

где $f_{ijkl}(\vec{r})$ – гладкая быстро убывающая с расстоянием функция.

Вследствие быстрого убывания функции $f_{ijkl}(\vec{r})$ с расстоянием можно ожидать, что член с суммой интегралов по соседним и более далеким зернам будет малой величиной по сравнению с интегралом по выделенному ξ -му зерну. Тогда можно применить метод теории возмущений. Обозначим решение уравнения (8) в отсутствие межкристаллитного взаимодействия $\varepsilon_{ij}^{(0)(\xi)}$ как решение нулевого порядка по межкристаллитному взаимодействию. Оно удовлетворяет уравнению

$$\varepsilon_{ij}^{(0)(\xi)}(\vec{r}_\xi) = \varepsilon_{ij}^* + \int_{\omega_\xi} d\vec{r}'_\xi g_{ijkl}(\vec{r}_\xi - \vec{r}'_\xi) \left[(C_{klmn}^{(\xi)}(\vec{r}'_\xi) - \langle C_{klmn} \rangle) \right] \varepsilon_{mn}^{(0)(\xi)}(\vec{r}'_\xi), \quad (9)$$

которое перепишем в виде неоднородного интегрального уравнения:

$$\int_{\omega_\xi} d\vec{r}'_\xi K_{ijmn}^{(\xi)}(\vec{r}_\xi - \vec{r}'_\xi) \varepsilon_{mn}^{(0)(\xi)}(\vec{r}'_\xi) = \varepsilon_{ij}^*, \quad (10)$$

где

$$K_{ijmn}^{(\xi)}(\vec{r}_\xi - \vec{r}'_\xi) = \delta(\vec{r}_\xi - \vec{r}'_\xi) I_{ijmn} - g_{ijkl}(\vec{r}_\xi - \vec{r}'_\xi) \left[(C_{klmn}^{(\xi)}(\vec{r}'_\xi) - \langle C_{klmn} \rangle) \right] \quad (11)$$

интегральное ядро.

Обозначим обусловленную взаимодействием поправку к нулевому решению как $\varepsilon_{ij}^{(\text{int})(\xi)}$, а точное решение (8) запишем в виде

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{ij}^{(\xi)} = \boldsymbol{\varepsilon}_{ij}^{(0)(\xi)} + \boldsymbol{\varepsilon}_{ij}^{(\text{int})(\xi)}. \quad (12)$$

Подставляя (12) в (8) с учетом (9), получим следующую систему интегральных уравнений для поправок $\boldsymbol{\varepsilon}_{ij}^{(\text{int})(\xi)}$:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\varepsilon}_{ij}^{(\text{int})(\xi)}(\vec{r}_\xi) &= \int_{\omega_\xi} d\vec{r}'_\xi \mathbf{g}_{ijkl}(\vec{r}_\xi - \vec{r}'_\xi) \left[\left(C_{klmn}^{(\xi)}(\vec{r}'_\xi) - \langle C_{klmn} \rangle \right) \right] \boldsymbol{\varepsilon}_{mn}^{(\text{int})(\xi)}(\vec{r}'_\xi) + \\ &+ \sum_{\eta \neq \xi} \int_{\omega_\eta} d\vec{r}'_\eta f_{ijkl}(\vec{r}_\xi - \vec{r}'_\eta) \left[\left(C_{klmn}^{(\eta)}(\vec{r}'_\eta) - \langle C_{klmn} \rangle \right) \right] \left[\boldsymbol{\varepsilon}_{mn}^{(0)(\eta)}(\vec{r}'_\eta) + \boldsymbol{\varepsilon}_{mn}^{(\text{int})(\eta)}(\vec{r}'_\eta) \right]. \end{aligned} \quad (13)$$

Система уравнений (13) для поправок к деформациям $\boldsymbol{\varepsilon}_{ij}^{(\text{int})(\xi)}$ является точной. Считая поправки $\boldsymbol{\varepsilon}_{ij}^{(\text{int})(\xi)}$ малыми по сравнению с $\boldsymbol{\varepsilon}_{ij}^{(0)(\xi)}$, пренебрежем ими в последнем члене в (13). После этого переобозначим поправку $\boldsymbol{\varepsilon}_{ij}^{(\text{int})(\xi)}$ как $\boldsymbol{\varepsilon}_{ij}^{(1)(\xi)}$, подчеркивая тем самым, что это поправка к нулевому решению в первом порядке по величине межкристаллитного взаимодействия. Для $\boldsymbol{\varepsilon}_{ij}^{(1)(\xi)}$ получаем уравнение

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\varepsilon}_{ij}^{(1)(\xi)}(\vec{r}_\xi) - \int_{\omega_\xi} d\vec{r}'_\xi \mathbf{g}_{ijkl}(\vec{r}_\xi - \vec{r}'_\xi) \left[\left(C_{klmn}^{(\xi)}(\vec{r}'_\xi) - \langle C_{klmn} \rangle \right) \right] \boldsymbol{\varepsilon}_{mn}^{(1)(\xi)}(\vec{r}'_\xi) = \\ = \sum_{\eta \neq \xi} \int_{\omega_\eta} d\vec{r}'_\eta f_{ijkl}(\vec{r}_\xi - \vec{r}'_\eta) \left[\left(C_{klmn}^{(\eta)}(\vec{r}'_\eta) - \langle C_{klmn} \rangle \right) \right] \boldsymbol{\varepsilon}_{mn}^{(0)(\eta)}(\vec{r}'_\eta), \end{aligned}$$

которое запишем в виде

$$\begin{aligned} \int_{\omega_\xi} d\vec{r}'_\xi K_{ijmn}^{(\xi)}(\vec{r}_\xi - \vec{r}'_\xi) \boldsymbol{\varepsilon}_{mn}^{(1)(\xi)}(\vec{r}'_\xi) = \\ = \sum_{\eta \neq \xi} \int_{\omega_\eta} d\vec{r}'_\eta f_{ijkl}(\vec{r}_\xi - \vec{r}'_\eta) \left[\left(C_{klmn}^{(\eta)}(\vec{r}'_\eta) - \langle C_{klmn} \rangle \right) \right] \boldsymbol{\varepsilon}_{mn}^{(0)(\eta)}(\vec{r}'_\eta). \end{aligned} \quad (14)$$

Итерационный процесс можно продолжить и получить уравнения для поправок 2-го порядка по взаимодействию. Полагая в точных уравнениях (13)

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{ij}^{(\text{int})(\xi)} = \boldsymbol{\varepsilon}_{ij}^{(1)(\xi)} + \boldsymbol{\varepsilon}_{ij}^{(2)(\xi)},$$

получим для поправок 2-го порядка точное интегральное уравнение:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{ij}^{(2)(\xi)}(\vec{r}_\xi) &= \int_{\omega_\xi} d\vec{r}'_\xi g_{ijkl}(\vec{r}_\xi - \vec{r}'_\xi) \left[\left(C_{klmn}^{(\xi)}(\vec{r}'_\xi) - \langle C_{klmn} \rangle \right) \right] \varepsilon_{mn}^{(2)(\xi)}(\vec{r}'_\xi) + \\ &+ \sum_{\eta \neq \xi} \int_{\omega_\eta} d\vec{r}'_\eta f_{ijkl}(\vec{r}_\xi - \vec{r}'_\eta) \left[\left(C_{klmn}^{(\eta)}(\vec{r}'_\eta) - \langle C_{klmn} \rangle \right) \right] \left[\varepsilon_{mn}^{(1)(\eta)}(\vec{r}'_\eta) + \varepsilon_{mn}^{(2)(\eta)}(\vec{r}'_\eta) \right]. \end{aligned} \quad (15)$$

Пренебрегая в последнем члене в правой части $\varepsilon_{ij}^{(2)(\xi)}$ по сравнению с $\varepsilon_{ij}^{(1)(\xi)}$, получим уравнение для $\varepsilon_{ij}^{(2)(\xi)}$:

$$\begin{aligned} &\int_{\omega_\xi} d\vec{r}'_\xi K_{ijmn}^{(\xi)}(\vec{r}_\xi - \vec{r}'_\xi) \varepsilon_{mn}^{(2)(\xi)}(\vec{r}'_\xi) = \\ &= \sum_{\eta \neq \xi} \int_{\omega_\eta} d\vec{r}'_\eta f_{ijkl}(\vec{r}_\xi - \vec{r}'_\eta) \left[\left(C_{klmn}^{(\eta)}(\vec{r}'_\eta) - \langle C_{klmn} \rangle \right) \right] \varepsilon_{mn}^{(1)(\eta)}(\vec{r}'_\eta). \end{aligned} \quad (16)$$

Аналогичные уравнения можно написать для поправок высших порядков и получить следующую бесконечную систему уравнений:

$$\begin{aligned} &\int_{\omega_\xi} d\vec{r}'_\xi K_{ijmn}^{(\xi)}(\vec{r}_\xi - \vec{r}'_\xi) \varepsilon_{mn}^{(0)(\xi)}(\vec{r}'_\xi) = \varepsilon_{ij}^*, \\ &\int_{\omega_\xi} d\vec{r}'_\xi K_{ijmn}^{(\xi)}(\vec{r}_\xi - \vec{r}'_\xi) \varepsilon_{mn}^{(1)(\xi)}(\vec{r}'_\xi) = \\ &= \sum_{\eta \neq \xi} \int_{\omega_\eta} d\vec{r}'_\eta f_{ijkl}(\vec{r}_\xi - \vec{r}'_\eta) \left[\left(C_{klmn}^{(\eta)}(\vec{r}'_\eta) - \langle C_{klmn} \rangle \right) \right] \varepsilon_{mn}^{(0)(\eta)}(\vec{r}'_\eta), \\ &\int_{\omega_\xi} d\vec{r}'_\xi K_{ijmn}^{(\xi)}(\vec{r}_\xi - \vec{r}'_\xi) \varepsilon_{mn}^{(2)(\xi)}(\vec{r}'_\xi) = \\ &= \sum_{\eta \neq \xi} \int_{\omega_\eta} d\vec{r}'_\eta f_{ijkl}(\vec{r}_\xi - \vec{r}'_\eta) \left[\left(C_{klmn}^{(\eta)}(\vec{r}'_\eta) - \langle C_{klmn} \rangle \right) \right] \varepsilon_{mn}^{(1)(\eta)}(\vec{r}'_\eta), \\ &\int_{\omega_\xi} d\vec{r}'_\xi K_{ijmn}^{(\xi)}(\vec{r}_\xi - \vec{r}'_\xi) \varepsilon_{mn}^{(3)(\xi)}(\vec{r}'_\xi) = \\ &= \sum_{\eta \neq \xi} \int_{\omega_\eta} d\vec{r}'_\eta f_{ijkl}(\vec{r}_\xi - \vec{r}'_\eta) \left[\left(C_{klmn}^{(\eta)}(\vec{r}'_\eta) - \langle C_{klmn} \rangle \right) \right] \varepsilon_{mn}^{(2)(\eta)}(\vec{r}'_\eta), \end{aligned} \quad (17)$$

и т.д. Всего имеется N таких систем.

Полное решение для деформаций в каждом кристаллите равно сумме всех поправок:

$$\varepsilon_{ij}^{(\xi)}(\vec{r}_\xi) = \varepsilon_{ij}^{(0)(\xi)}(\vec{r}_\xi) + \varepsilon_{ij}^{(1)(\xi)}(\vec{r}_\xi) + \varepsilon_{ij}^{(2)(\xi)}(\vec{r}_\xi) + \varepsilon_{ij}^{(3)(\xi)}(\vec{r}_\xi) + \dots, \quad \xi = 1, 2, \dots, N. \quad (18)$$

Из (17) видно, что уравнения для поправок различных порядков по взаимодействию представляют собой цепочку зацепляющихся систем уравнений. Это типичная ситуация при построении решений задач систем многих взаимодействующих частиц в статистической физике (цепочка уравнений Боголюбова для многочастичных функций распределения [14, 15]) и квантовой теории взаимодействующих полей (цепочка уравнений Дайсона-Швингера для функций Грина полей [16]), где для получения приближенных решений используют обрывание цепочек на основе тех или иных аргументов. Особенностью уравнений (17) является то, что поправки высших порядков выражаются через поправки низших порядков (в отличие от цепочек уравнений Боголюбова и квантовой теории поля, где ситуация обратная). Система уравнений (17) есть система неоднородных интегральных уравнений с одним и тем же ядром $K_{ijmn}^{(\xi)}(\vec{r}_\xi - \vec{r}'_\xi)$. Если найден способ решения первого уравнения для $\epsilon_{mn}^{(0)(\xi)}(\vec{r}_\xi)$, то, подставив $\epsilon_{mn}^{(0)(\xi)}(\vec{r}_\xi)$ в правую часть второго уравнения, тем же способом находим поправку первого порядка $\epsilon_{mn}^{(1)(\xi)}(\vec{r}_\xi)$ и т.д., то есть в конечном счете полное решение для деформаций в кристаллитах (18). Ядра в интегральных уравнениях (17) являются сингулярными.

В данной работе будем пренебрегать неоднородностью деформаций внутри кристаллитов и сосредоточимся на оценке влияния взаимодействия кристаллитов. В работе [13] было показано, что в этом случае уравнение (9) нулевого порядка можно свести к системе линейных алгебраических уравнений

$$\left[I_{ijkl} - A_{ijkl}^{(\xi)} \right] \epsilon_{kl}^{(0)(\xi)} = \epsilon_{ij}^*, \quad (19)$$

где

$$\begin{aligned} A_{ijkl}^{(\xi)} &= \int_{\omega_\xi} d\vec{r}'_\xi g_{ijkl}(\vec{r}_\xi - \vec{r}'_\xi) \left[C_{klmn}^{(\xi)}(\vec{r}'_\xi) - \langle C_{klmn} \rangle \right] = \\ &= \left[\int_{\omega_\xi} d\vec{r}'_\xi g_{ijkl}(\vec{r}_\xi - \vec{r}'_\xi) \right] \left(C_{klmn}^{(\xi)} - \langle C_{klmn} \rangle \right) = \quad (20) \\ &= \left[\frac{1}{3}(4\chi - 1)V_{ijkl} + \frac{2}{3}\left(1 - \frac{2}{5}\chi\right)D_{ijkl} + \frac{\chi}{5\langle\mu\rangle}V_{ijmn}C_{mnkl}^{(\xi)} - \frac{\left(1 - \frac{2}{5}\chi\right)}{3\langle\mu\rangle}C_{ijkl}^{(\xi)} \right]. \end{aligned}$$

Здесь V_{ijkl} и D_{ijkl} – шаровая и девиаторная части единичного симметричного тензора 4-го ранга $I_{ijkl} = \frac{1}{2}(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk})$. Таким образом, интегральный оператор с ядром $K_{ijmn}^{(\xi)}(\vec{r}_\xi - \vec{r}'_\xi)$ в левой части первого уравнения в (17), действующий на $\epsilon_{mn}^{(0)(\xi)}(\vec{r}_\xi)$, сводится к умножению на постоянный тензор $[I_{ijmn} - A_{ijmn}^{(\xi)}]$.

Аналогичным образом в предположении постоянства поправок всех порядков в пределах каждого кристаллита можно преобразовать левые части всех остальных уравнений в (17). В итоге получается следующая бесконечная цепочка систем линейных алгебраических уравнений для поправок всех порядков:

$$\begin{aligned}
 [I_{ijmn} - A_{ijmn}^{(\xi)}] \epsilon_{mn}^{(0)(\xi)} &= \epsilon_{ij}^*, \\
 [I_{ijmn} - A_{ijmn}^{(\xi)}] \epsilon_{mn}^{(1)(\xi)} &= \sum_{\eta \neq \xi} \int_{\omega_\eta} d\vec{r}'_\eta f_{ijkl}(\vec{r}_\xi - \vec{r}'_\eta) \left[(C_{klmn}^{(\eta)}(\vec{r}'_\eta) - \langle C_{klmn} \rangle) \right] \cdot \epsilon_{mn}^{(0)(\eta)}, \\
 [I_{ijmn} - A_{ijmn}^{(\xi)}] \epsilon_{mn}^{(2)(\xi)} &= \sum_{\eta \neq \xi} \int_{\omega_\eta} d\vec{r}'_\eta f_{ijkl}(\vec{r}_\xi - \vec{r}'_\eta) \left[(C_{klmn}^{(\eta)}(\vec{r}'_\eta) - \langle C_{klmn} \rangle) \right] \cdot \epsilon_{mn}^{(1)(\eta)}, \quad (21) \\
 [I_{ijmn} - A_{ijmn}^{(\xi)}] \epsilon_{mn}^{(3)(\xi)} &= \sum_{\eta \neq \xi} \int_{\omega_\eta} d\vec{r}'_\eta f_{ijkl}(\vec{r}_\xi - \vec{r}'_\eta) \left[(C_{klmn}^{(\eta)}(\vec{r}'_\eta) - \langle C_{klmn} \rangle) \right] \cdot \epsilon_{mn}^{(2)(\eta)}
 \end{aligned}$$

и т.д.

В (21) все поправки $\epsilon_{ij}^{(0)(\xi)}, \epsilon_{ij}^{(1)(\xi)}, \epsilon_{ij}^{(2)(\xi)}, \dots$ являются кусочно-постоянными функциями координат, скачком изменяющими значения при переходе границ кристаллитов. Поэтому у них опущено указание на зависимость от \vec{r}_ξ .

В правые части уравнений для поправок входят одни и те же интегралы. Эти интегралы представляют собой набор постоянных тензорных (по нижним индексам i, j, m, n) коэффициентов, зависящих от реализации структуры поликристаллического тела – формы и размеров всех зерен. Обозначим их как

$$B_{ijmn}^{(\xi\eta)} \equiv \int_{\omega_\eta} d\vec{r}'_\eta f_{ijkl}(\vec{r}_\xi - \vec{r}'_\eta) \left[(C_{klmn}^{(\eta)}(\vec{r}'_\eta) - \langle C_{klmn} \rangle) \right], \quad \xi \neq \eta. \quad (22)$$

Из (22) и (20) видно, что

$$B_{ijkl}^{(\xi\xi)} = A_{ijkl}^{(\xi)}. \quad (23)$$

Таким образом, коэффициенты $B_{ijkl}^{(\xi\eta)}$ образуют квадратную матрицу из тензорных элементов, которую можно назвать матрицей взаимодействия кристаллитов. Количество элементов этой матрицы макроскопически велико. Каждый элемент матрицы $B_{ijmn}^{(\xi\eta)}$ в рассматриваемом приближении описывает взаимодействие компонент тензоров деформаций в ξ -м и η -м кристаллитах. Диагональные элементы $B_{ijmn}^{(\xi\xi)}$ определяют «самодействие» деформаций в пределах одного кристаллита. Пренебрежение всеми недиагональными элементами $B_{ijmn}^{(\xi\eta)}$ соответствует отсутствию межкристаллитного взаимодействия, рассмотренному в [13].

Цепочка уравнений для поправок принимает симметричный компактный вид:

$$\begin{aligned} [I_{ijkl} - B_{ijkl}^{(\xi\xi)}] \epsilon_{kl}^{(0)(\xi)} &= \epsilon_{ij}^*, \\ [I_{ijkl} - B_{ijkl}^{(\xi\xi)}] \epsilon_{kl}^{(1)(\xi)} &= \sum_{\eta \neq \xi} B_{ijkl}^{(\xi\eta)} \epsilon_{kl}^{(0)(\eta)}, \\ [I_{ijkl} - B_{ijkl}^{(\xi\xi)}] \epsilon_{kl}^{(2)(\xi)} &= \sum_{\eta \neq \xi} B_{ijkl}^{(\xi\eta)} \epsilon_{kl}^{(1)(\eta)}, \\ [I_{ijkl} - B_{ijkl}^{(\xi\xi)}] \epsilon_{kl}^{(3)(\xi)} &= \sum_{\eta \neq \xi} B_{ijkl}^{(\xi\eta)} \epsilon_{kl}^{(2)(\eta)} \text{ и т.д.} \end{aligned} \quad (24)$$

Каждое из уравнений в (24) есть система шести линейных алгебраических уравнений для шести компонент поправок тензора деформаций в ξ -м кристаллите. Всего имеется N систем уравнений. Таким образом, последовательно решая уравнения начиная с первого (поправки нулевого порядка по взаимодействию), можно вычислить поправки всех порядков. Однако симметрия тензоров $B_{ijkl}^{(\xi\eta)}$ низкая, поэтому решать (24) можно только численно. При алгоритмической реализации процесс можно остановить при достижении заданной точности, например если величина поправки очередного порядка составит менее 1 % от поправки нулевого уровня.

Из второго уравнения цепочки (24) видно, что поправки первого порядка для какого-либо зерна определяются исключительно дефор-

мациями нулевого окружающих зерен и не зависят от деформации в выбранном зерне. Однако поправки более высокого порядка начинают зависеть от величины деформации в выбранном зерне. Например, поправка второго порядка (третье уравнение цепочки (24)) зависит от деформации в выбранном зерне через поправки первого порядка в других зернах (правая часть третьего уравнения), которые зависят в том числе от деформации в выбранном зерне.

2. Приближение ближайших соседей

В статистической физике взаимодействующих частиц (твердых тел и жидкостей) очень хорошие результаты дает приближение ближайших соседей, в котором учитывается взаимодействие выделенного атома только с ближайшими соседями. Это обусловлено очень быстрым спаданием межатомных потенциалов (экспоненциальное или степенное r^{-n} с $n \geq 6$). В приведенном формализме описания упругого деформирования поликристаллов взаимодействие зерен описывается интегралами $B_{ijmn}^{(\xi n)}$ (18), которые зависят от расстояния между зернами и формы зерен. Нетрудно видеть, что для удаленных друг от друга зерен эти величины убывают с расстоянием, как r^{-3} , т.е. достаточно быстро.

В поликристаллических материалах размеры (объем) зерен случайны, распределены вокруг некоторых средних значений, при этом вероятность появления очень больших и очень малых зерен мала (что обычно имеет место для литых сплавов, спеченных керамик). Аппроксимируем такое распределение зерен по объемам плотностью вероятностей вида $\psi(\omega_\xi) \equiv \delta(\omega_\xi - \bar{\omega})$, где $\delta(\vec{r})$ – дельта-функция Дирака, а $\bar{\omega}$ – средний объем зерна. Форма зерен обычно имеет вид выпуклых многогранников, близких к сфероидам, что обусловлено минимизацией поверхностной энергии межфазных границ при кристаллизации из расплава или спекании порошков. В структуре такого поликристалла можно выделить (как это принято в теории жидкостей и аморфных твердых тел [17]) координационные сферы, окружающие каждое зерно. Первая сфера содержит ближайшие зерна-соседи, вторая – следующие за ближайшими зернами и т.д. Если средний диаметр зерен обозначить d , то первая координационная сфера имеет наружный диаметр $3d$ и внутренний d , вторая соответственно – $5d$ и $3d$ и т.д. Если принять форму

зерен близкой к сферической, т.е. $\bar{\omega} \approx \frac{1}{6}\pi d^3$, то число зерен в первой координационной сфере в среднем $\left(\frac{1}{6}\pi(3d)^3 - \frac{1}{6}\pi d^3\right) / \left(\frac{1}{6}\pi d^3\right) = 3^3 - 1^3 = 26$, во второй $(5^3 - 3^3) = 98$, в n -й сфере $[(2n+1)^3 - (2n-1)^3] = 24n^2 + 2$. Таким образом, количество зерен в координационных сферах растет пропорционально квадрату номера сферы и является четным. Следуя этой схеме, суммы в правых частях уравнений (24) можно разбить по координационным сферам.

Вклад далеких координационных сфер убывает обратно пропорционально кубу расстояний до них. Пренебрежем вкладом далеких зерен и ограничимся учетом влияния только ближайших соседей. Это означает, что во всех суммах в (24) суммирование должно производиться только по η , соответствующим ближайшим зернам-соседям к ξ -му зерну. Отметим это обстоятельство цифрой 1 в фигурных скобках над знаками сумм

$$\begin{aligned} [I_{ijkl} - B_{ijkl}^{(\xi\xi)}] \epsilon_{kl}^{(0)(\xi)} &= \epsilon_{ij}^* , \\ [I_{ijkl} - B_{ijkl}^{(\xi\xi)}] \epsilon_{kl}^{(1)(\xi)} &= \sum_{\eta \neq \xi}^{\{1\}} B_{ijkl}^{(\xi\eta)} \epsilon_{kl}^{(0)(\eta)} , \\ [I_{ijkl} - B_{ijkl}^{(\xi\xi)}] \epsilon_{kl}^{(2)(\xi)} &= \sum_{\eta \neq \xi}^{\{1\}} B_{ijkl}^{(\xi\eta)} \epsilon_{kl}^{(1)(\eta)} \text{ и т.д.} \end{aligned} \tag{25}$$

Полная деформация равна сумме решений всех уравнений (25).

Не решая систему (25), можно сделать качественное заключение о влиянии взаимодействия на разброс значений случайных деформаций. Поправки нулевого порядка $\epsilon_{ij}^{(0)(\xi)}$ для соседних зерен, как это видно из первого уравнения (25), статистически независимы, так как коэффициенты $B_{ijkl}^{(\xi\xi)}$ определяются исключительно параметрами выделенного зерна. Из второго уравнения (25) следует, что поправки первого порядка $\epsilon_{ij}^{(1)(\xi)}$ в выделенном зерне статистически независимы от поправок $\epsilon_{ij}^{(0)(\xi)}$ в этом зерне, так как они выражаются через статистически независимые поправки нулевого порядка $\epsilon_{ij}^{(0)(\eta)}$ в соседних зернах.

Таким образом, поправки первого порядка по взаимодействию и деформации нулевого порядка являются независимыми случайными величинами. Поэтому максимальные значения поправок 1-го порядка и максимальные значения деформаций нулевого порядка могут с некоторой вероятностью быть одного знака и оказаться в одном и том же зерне. Таким образом, взаимодействие зерен ведет к увеличению разброса случайных значений деформаций (и напряжений). Оценим вклад взаимодействия зерен в увеличение этого разброса.

Метод построения статистических распределений для деформаций нулевого порядка $\varepsilon_{ij}^{(0)(\xi)}$ подробно исследован в [18]. Метод заключается в том, что весь поликристаллический агрегат заменяется случайной выборкой конечного, но большого числа зерен (порядка 10^4 штук). Микродеформации (и микронапряжения) в зернах выборки находятся решением 10^4 систем уравнений первой строки в (25). Распределения для каждой компоненты деформаций строятся по 10^4 полученным расчетным точкам. Например, при макросдвиге $\varepsilon_{12}^* = 2 \cdot 10^{-4}$ в плоскости 1–2 для поликристалла цинка (гексагональные зерна с высокой степенью анизотропии) плотность распределения для компоненты микродеформаций $\varepsilon_{12}^{(0)(\xi)}$ в зернах в лабораторной системе координат (система координат образца поликристалла) имеет вид, представленный на рисунке.

В приближении ближайших соседей этим же методом можно построить распределения для случайных величин $\varepsilon_{ij}^{(1)(\xi)}$. Вычисления показали, что распределения деформаций с учетом поправок первого порядка по взаимодействию имеют качественно такой же вид, как распределение на рисунке для деформаций нулевого порядка, но изменяются маргинальные значения, т.е. величина разброса случайных деформаций.

Целью настоящей статьи является оценка влияния межзеренного взаимодействия на деформированное состояние индивидуальных зерен. Для этого можно не строить полные распределения для случайных деформаций, а просто сравнить максимальные и минимальные значения деформаций нулевого порядка по взаимодействию $\varepsilon_{ij \max}^{(0)(\xi)}$ и $\varepsilon_{ij \min}^{(0)(\xi)}$, поправок первого $\varepsilon_{ij \max}^{(1)(\xi)}$ и $\varepsilon_{ij \min}^{(1)(\xi)}$ и последующих порядков, а также пол-

ных деформаций $\varepsilon_{ij \max}^{(\xi)}$ и $\varepsilon_{ij \min}^{(\xi)}$ по ансамблю выборки. В силу линейности краевой задачи (3) удобно сравнить также относительные величины $\frac{\varepsilon_{ij \max/\min}^{(0)(\xi)}}{\varepsilon_{ij}^*}$ и $\frac{\varepsilon_{ij \max/\min}^{(\xi)}}{\varepsilon_{ij}^*}$, которые не зависят от выбранной величины макродеформации. Сделаем такое сравнение для сдвиговых компонент деформаций $\varepsilon_{12 \max/\min}^{(0)(\xi)}$, $\varepsilon_{12 \max/\min}^{(1)(\xi)}$ и $\varepsilon_{12 \max/\min}^{(\xi)}$ для случая макросдвига в плоскости X_1X_2 .

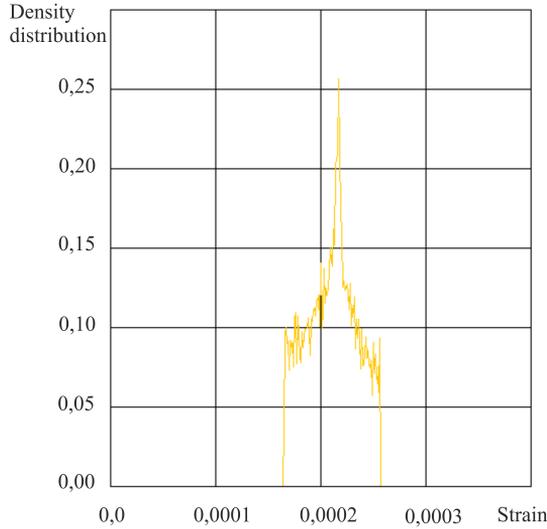


Рис. Распределение сдвиговых деформаций нулевого порядка $\varepsilon_{12}^{(0)(\xi)}$ в зернах при макросдвиге в плоскости 1–2

Вычислим упомянутые маргинальные значения случайных деформаций в приближении ближайших соседей. Для этого нужно прежде всего вычислить коэффициенты $B_{ijmn}^{(\xi\eta)}$ для ближайших соседей. Учитывая, что тензоры $C_{klmn}^{(\eta)}(\vec{r}'_{\eta})$ постоянны в пределах зерна, выражения (18) для $B_{ijmn}^{(\xi\eta)}$ можно переписать в следующем виде:

$$B_{ijmn}^{(\xi\eta)} = b_{ijkl}^{(\xi\eta)} \frac{C_{klmn}^{(\eta)} - \langle C_{klmn} \rangle}{\langle \mu \rangle}, \quad (26)$$

где

$$b_{ijkl}^{(\xi\eta)} \equiv \int_{\omega_{\eta}} d\vec{r}'_{\eta} \tilde{f}_{ijkl}(\vec{r}'_{\xi} - \vec{r}'_{\eta}), \quad \tilde{f}_{ijkl}(\vec{r}) \equiv \langle \mu \rangle f_{ijkl}(\vec{r}). \quad (27)$$

Коэффициенты $b_{ijkl}^{(\xi\eta)}$ являются безразмерными, определяются геометрической формой η -го зерна и его положением относительно ξ -го зерна, не зависят от физических свойств зерен, то есть описывают геометрическую структуру поликристалла. В то же время коэффициенты $B_{ijmn}^{(\xi\eta)}$, будучи также безразмерными, зависят от ориентации кристаллографических осей зерен, т.е. физической структуры поликристалла. Для оценки порядка величины коэффициентов и упрощения интегрирования примем сферическую форму выделенного ξ -го кристаллита, а начало координат поместим в центре этого кристаллита. Соседние кристаллиты, расположенные в первой координационной сфере, выберем в форме секторов шарового слоя. Такой шаровой сектор напоминает куб с искривленными гранями. Он ограничен двумя сферическими поверхностями $r = \frac{d}{2}$ и $r = \frac{3}{2}d$, двумя коническими поверхностями $\theta = \theta_\eta$ и $\theta = \theta_\eta + \Delta\theta$ и двумя меридианальными плоскостями $\varphi = \varphi_\eta$ и $\varphi = \varphi_\eta + \Delta\varphi$. В соответствии с вышеизложенным в шаровом слое всего должно находиться 26 таких секторов. Объем сектора принимаем равным среднему объему зерна в поликристалле $\bar{\omega} \approx \frac{1}{6}\pi d^3$. Простое геометрическое моделирование показывает, что 26 таких одинаковых по объему секторов можно разместить в шаровом слое следующим образом: по одному сектору в зените и надире, 10 секторов по экватору и по 7 секторов в двух поясах «средних широт», то есть между экваториальным поясом и зенитом и надиром.

Полное число коэффициентов для ближайших соседей $b_{ijkl}^{(\xi\eta)}$ велико: $26 \times 3 \times 3 \times 3 \times 3 = 2106$. В качестве иллюстрации порядка величин коэффициентов приведем результаты вычислений для двадцати шести коэффициентов $b_{1212}^{(\xi\eta)}$, $\eta = 1, 2, \dots, 26$, которые характеризуют взаимодействие сдвиговой компоненты деформации $\epsilon_{12}^{(1)(\xi)}$ в ξ -м зерне со сдвиговой компонентой деформации $\epsilon_{12}^{(0)(\eta)}$ в η -м соседнем зерне. Прономеруем все секторы-зерна, начиная с зенита (зерно 1), далее зерна верхнего слоя средних широт против часовой стрелки, начиная с $\varphi_\eta = 0$, (зерна 2–8), далее экваториальный слой (зерна 9–18), затем нижний слой средних широт (зерна 19–25) и зерно в надире – номер 26. Результаты вычислений представлены в табл. 1.

Таблица 1

Значения коэффициентов $b_{1212}^{(\xi\eta)}$

Номер зерна-соседа	Значения коэффициентов $b_{1212}^{(\xi\eta)}$									
	1	-0,0086	–	–	–	–	–	–	–	–
2–8	-0,0122	0,0071	0,0036	-0,0234	0,0036	0,0071	-0,0122	–	–	–
9–18	-0,0206	0,0288	0,0188	0,0288	-0,0206	-0,0206	0,0288	0,0188	0,0288	-0,0206
19–25	-0,0122	0,0071	0,0036	-0,0234	0,0036	0,0071	-0,0122	–	–	–
26	-0,0086	–	–	–	–	–	–	–	–	–

Коэффициенты $b_{1212}^{(\xi\eta)}$ малы, знакопеременны и флуктуируют около нулевого значения. Тем не менее характеризуемое ими взаимодействие дает значительный вклад в увеличение маргинальных значений деформаций.

Для вычисления упомянутых маргинальных значений поступим как в работе [18]. Заменяем весь поликристалл случайной выборкой из 10^4 зерен со случайной ориентацией кристаллографических осей. Каждое из зерен выборки окружаем координационной сферой с 26 ближайшими зернами-соседями. Форму зерен-соседей принимаем как описано выше, ориентация кристаллографических осей зерен-соседей случайна и не коррелирует с ориентацией зерен выборки. Это моделирует нетекстурированный поликристалл. Алгоритм решает системы линейных уравнений (25), генерирует массивы по 6×10^4 компонент каждого из тензоров $\epsilon_{ij}^{(0)(\xi)}$, $\epsilon_{ij}^{(1)(\xi)}$, $\epsilon_{ij}^{(1)(\xi)}$, ..., а также полной деформации $\epsilon_{ij}^{(\xi)}$ и выбирает максимальные и минимальные значения этих тензоров из элементов массивов. Процесс повторяется до 10^2 и более раз. Таким образом, общий объем случайной выборки для каждой компоненты случайных тензоров деформаций составляет не менее 10^6 значений, что представляется статистически достаточным. Общее время работы алгоритма на компьютере с четырехядерным 64-разрядным процессором Intel i7-3820@3,6ГГц и оперативной памятью 16 Гб составляет около 15 часов.

Для анизотропных сред наиболее информативно представление напряженно-деформированного состояния в системе координат осей упругой симметрии. Для кристаллитов это кристаллографическая сис-

тема координат. Численное решение систем уравнений (25) производится в лабораторной системе координат. Значения компонент тензоров деформаций в кристаллографической для каждого зерна системе координат вычисляются по формулам

$$\epsilon_{ij}^{(\xi)}(\vec{r}) = \beta_{im}^{(\xi)}(\vec{r})\beta_{jn}^{(\xi)}(\vec{r})\epsilon_{mn},$$

где $\beta_{ij}^{(\xi)}(\vec{r})$ – матрица, обратная матрице направляющих косинусов в (1) для каждого кристаллита.

Результаты вычислений для компоненты тензора деформаций ϵ_{12} при макродеформации сдвига $\epsilon_{12}^* = 0,0001$ приведены в табл. 2 в абсолютных и относительных единицах.

Таблица 2

Маргинальные значения случайных деформаций

	$\epsilon_{12}^* = 0,0001$			
	min. в абсолютных единицах	max. в абсолютных единицах	относительная величина поправок $\epsilon_{12}^{(n)(\xi)} / \epsilon_{12}^{(0)(\xi)}, \%$	относительная величина поправок $\epsilon_{12}^{(n)(\xi)} / \epsilon_{12}^*, \%$
$\epsilon_{12}^{(0)(\xi)}$	$-1,64 \cdot 10^{-4}$	$+1,64 \cdot 10^{-4}$	100	164
$\epsilon_{12}^{(1)(\xi)}$	$-9,8 \cdot 10^{-5}$	$+9,8 \cdot 10^{-5}$	59,8	98,0
$\epsilon_{12}^{(2)(\xi)}$	$-6,85 \cdot 10^{-6}$	$+6,85 \cdot 10^{-6}$	4,2	6,85
$\epsilon_{12}^{(n)(\xi)}, n \geq 3$	$ \epsilon < 10^{-6}$	$< 10^{-6}$	<1	<1
$\epsilon_{12}^{(\xi)} = \sum_{n=1}^{\infty} \epsilon_{12}^{(n)(\xi)}$	$-2,24 \cdot 10^{-4}$	$+2,68 \cdot 10^{-4}$	163	268

Данные табл. 2 дают представление о степени влияния упругого взаимодействия выделенного зерна с ближайшими соседями на деформированное состояние каждого отдельного кристаллита. Видно, что поправки к решению краевой задачи (9) без учета межзеренного взаимодействия составляют весьма значительную величину. Величина поправок достаточно быстро убывает с возрастанием номера порядка поправки. Поправки второго порядка по взаимодействию $\epsilon_{12}^{(2)(\xi)}$ составляют всего 4,2 % от поправки нулевого порядка $\epsilon_{12}^{(0)(\xi)}$ (и около 7 % от поправки первого порядка), а поправки третьего и более высоких по-

рядков отличаются от поправки нулевого порядка менее чем на 1 %. Поэтому с точностью не хуже одного процента бесконечную цепочку уравнений (25) можно ограничить первыми тремя уравнениями.

Интересно сравнить полученное решение с приближением Фойгта, в котором деформация в зерне приравнивается макродеформации, что соответствует полному пренебрежению всеми упругими взаимодействиями, в том числе в пределах одного зерна. Полная деформация в отдельном зерне (последняя строка в табл. 2) может более чем в два с половиной раза превосходить значение макродеформации. Таким образом случайное поле деформаций в поликристаллическом материале является сильно флуктуирующим, а упругое взаимодействие зерен играет существенную роль в формировании этих флуктуаций.

Заключение

В работе предложен метод приближенного решения краевой задачи теории упругости для кусочно-неоднородной поликристаллической среды. Интегральная форма краевой задачи (3) означает взаимозависимость деформаций в различных точках тела и выражает значение деформации в выбранной точке \vec{r} через деформацию в этой же точке и во всех остальных точках тела, то есть своеобразное взаимодействие деформаций. Для поликристаллической среды пренебрежение неоднородностью деформаций в пределах одного зерна позволяет перейти от рассмотрения континуального множества взаимодействующих пар точек в теле к взаимодействию дискретного множества зерен. Достаточно быстрое убывание взаимодействия с увеличением расстояния между зернами позволяет разложить гипотетическое точное решение краевой задачи на два слагаемых: первое учитывает только «самодействие» деформаций в пределах выделенного зерна, а второе – взаимодействие со всеми остальными зернами поликристаллического тела и рассматривать межзеренное взаимодействие как некоторое возмущение решения нулевого порядка (первого слагаемого гипотетически точного решения). Применение итерационной процедуры сводит решение исходной интегральной краевой задачи к бесконечной цепочке систем линейных алгебраических уравнений для поправок различных порядков. Численное решение для поликристаллического цинка показало, что итерационная процедура достаточно быстро сходится, и в бесконечной цепочке (25) можно ограничиться первыми тремя уравнениями с точностью не хуже одного процента.

Предложенный метод позволяет исследовать статистические характеристики полей деформаций в поликристалле на больших массивах-выборках случайных значений (10^4 и более элементов), учитывает влияние формы и размеров зерен на деформированное состояние зерен, может быть использован для прогнозирования влияния микроструктуры на макроскопические свойства поликристаллических материалов. В работе рассмотрено применение метода к однофазным нетекстурированным поликристаллам, но метод может быть распространен на многокомпонентные и текстурированные поликристаллические материалы.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 13-01-96052p_урал_a).

Библиографический список

1. Voigt W. Lehrbuch der Kristalphysik. – Berlin, Teubner, 1928. – P. 962.
2. Reuss A. Berechnung der Fließgrenze von Mischkristallen auf Grund der Plastizitätsbedingung für Einkristalle // Z. Angew. Math. und Mech. – 1929. – Vol. 9. – No. 1. – P. 49.
3. Лифшиц И.М., Розенцвейг Л.Н. К теории упругих свойств поликристаллов // Журн. эксп. теор. физ. – 1946. – Т. 16, № 11. – С. 967–980.
4. Лифшиц И.М., Розенцвейг Л.Н. Поправка к статье «К теории упругих свойств поликристаллов» // Журн. эксп. теор. физ. – 1951. – Т. 21, № 10. – С. 1184–1185.
5. Handbook of Materials Modeling / Ed. Sidney Yip. – Springer, 2007. – 2965 p.
6. Junior M., Neto E., Munoz-Rojas P. Advanced Computational Materials Modeling: From Classical to Multiscale Techniques. – WILEY-VCH Verlag GmbH & Co.KGaA, 2010. – 450 p.
7. Физическая мезомеханика и компьютерное конструирование материалов: в 2 т. / Панин В.Е. [и др.]. – Новосибирск: Наука; Сиб. отделение, 1995. – Т. 1. – 297 с.; Т. 2. 317 с.
8. Волков С.Д., Ставров В.П. Статистическая механика композитных материалов. – Минск: Изд-во Белорус. гос. ун-та, 1976. – 206 с.
9. Богачев И.Н., Вайнштейн А.А., Волков С.Д. Статистическое металловедение. – М.: Металлургия, 1984. – 176 с.

10. Шермергор Т.Д. Теория упругости микронеоднородных сред. – М.: Наука, 1977. – 400 с.
11. Трусов П.В., Швейкин А.И. Теория пластичности. – Пермь: Изд-во Перм. нац. исслед. политехн. ун-та, 2011. – С. 418.
12. Новожилов В.В., Кадашевич Ю.И. Микронапряжения в конструкционных материалах. – Л.: Машиностроение, 1990. – 224 с.
13. Ташкинов А.А., Шавшуков В.Е. Теоретико-полевой подход к описанию деформирования многокомпонентных поликристаллических материалов // Вестник Самарского государственного технического университета. Серия: Физико-математические науки. – 2013. – № 4. – С. 86–97.
14. Боголюбов Н.Н. Избранные труды по статистической физике. – М.: Наука, 1979. – 450 с.
15. Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Физическая кинетика. – М.: Наука, 1979. – 527 с.
16. Боголюбов Н.Н., Ширков Д.В. Введение в теорию квантованных полей. – М.: Наука, 1984. – 597 с.
17. Займан Дж. Модели беспорядка. – М.: Мир, 1982. – 591 с.
18. Шавшуков В.Е. Распределение полей напряжений в поликристаллических материалах // Физическая мезомеханика. – 2012. – Т. 15, № 6. – С. 85–91.

References

1. Voight W. Lehrbuch der Kristalphysik. Berlin, Teubner, 1928. P. 962.
2. Reuss A. Berechnung der Fließgrenze von Mischkristallen auf grund der plastizitätsbedingung für Einkristalle. *Z. Angew. Math. und Mech.*, 1929, vol. 9, no. 1, p. 49.
3. Lifshitz I.M., Rosenzweig L.N. К теории упругих свойств поликристаллов [On the theory of elastic properties of polycrystals]. *Zhurnal eksperimentalnoi i teoreticheskoi fiziki*, 1946, vol.16, no. 11, pp. 967-980.
4. Lifshitz I.M., Rosenzweig L.N. Поправка к статье “К теории упругих свойств поликристаллов” [Amendment to the paper “On the theory of elastic properties of polycrystals”]. *Zhurnal eksperimentalnoi i teoreticheskoi fiziki*, 1946, vol. 16, no. 11, pp. 967-980.
5. Handbook of Materials Modeling. Ed. Sidney Yip. Springer, 2007. 2965 p.

6. Junior M., Neto E., Munoz-Rojas P. Advanced Computational Materials Modeling: From Classical to Multiscale Techniques. WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2010. 450 p.

7. Panin V.E. [et al.] Fizicheskaya mezomekhanika i kompiuternoe konstruirovaniye materialov [Physical mezomechanics and computer materials designing]. Novosibirsk: Nauka. Sibirskoe otdeleniye, 1995, vol. 1, 297 p.; vol. 2, 317 p.

8. Volkov S.D., Stavrov V.P. Statisticheskaya mekhanika kompozitsionnykh materialov [Statistical mechanics of composite materials]. Minsk: Belorusskii gosudarstvennyi universitet, 1976. 206 p.

9. Bogachev I.N., Vainshtein A.A., Volkov S.D. Statisticheskoye metalovedeniye [Statistical metallography]. Moscow: Metallurgiya, 1984. 176 p.

10. Shermergor T.D. Teoriya uprugosti mikroneodnorodnykh sred [Theory of elasticity of micro inhomogeneous media]. Moscow: Nauka, 1977. 400 p.

11. Trusov P.V., Shveikin A.I. Teoriya plastichnosti [Theory of plasticity]. Permskii natsionalnyi issledovatel'skii politekhnicheskii universitet, 2011. 418 p.

12. Novozhilov V.V., Kadashevich Yu.I. Mikronapryazheniya v konstruktsionnykh materialakh [Micro stresses in structural materials]. Leningrad: Mashinostroeniye, 1990. 224 p.

13. Tashkinov A.A., Shavshukov V.E. Teoretiko-polevoi podkhod k opisaniyu defgormirovaniya mnogokomponentnykh polikristallicheskikh materialov [Field-theoretic approach for characterization the deformation of multicomponent polycrystalline materials]. *Vestnik Samarskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta. Fiziko-matematicheskie nauki*, 2013, no. 4, pp. 86-97.

14. Bogolyubov N.N. Izbrannyye trudy po statisticheskoy fizike [Selected works on statistical physics]. Moscow: Nauka, 1979. 450 p.

15. Lifshits E.M., Pitaevskii L.P. Fizicheskaya kinetika [Physical kinetics]. Moscow: Nauka, 1979. 527 p.

16. Bogolyubov N.N., Shirkov D.V. Vvedeniye v teoriyu kvantovannykh polei [Introduction to the theory of quantum fields]. Moscow: Nauka, 1984. 597 p.

17. Ziman J.M. Modeli besporyadka [Models of Disorder]. Moscow: Mir, 1982. 591 p.

18. Shavshukov V.E. Raspredeleniye polei napryazhenii v polikristallicheskih materialakh [The distribution of stress fields in polycrystalline materials]. *Fizicheskaya mekhanika*, 2012, vol. 15, no. 6, pp. 85-91.

Об авторах

Шавшуков Вячеслав Евгеньевич (Пермь, Россия) – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры механики композиционных материалов и конструкций Пермского национального исследовательского политехнического университета (614990, г. Пермь, Комсомольский пр., 29, e-mail: shavshukov@pstu.ru).

About the authors

Viacheslav E. Shavshukov (Perm, Russian Federation) – PhD in Physical and Mathematical Sciences, Assistant Professor, Department of Mechanics of Composite Materials and Structures, Perm National Research Polytechnic University (29, Komsomolsky av., 614990, Perm, Russian Federation, e-mail: shavshukov@pstu.ru).

Получено 12.09.2014

Просьба ссылаться на эту статью в русскоязычных источниках следующим образом:

Шавшуков В.Е. Упругое взаимодействие зерен в поликристаллических материалах // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2014. – № 4. – С. 197–220. DOI: 10.15593/perm.mech/2014.4.08

Please cite this article in English as:

Shavshukov V.E. Elastic interaction of grains in polycrystalline materials. *PNRPU Mechanics Bulletin*. 2014. No. 4. Pp. 197-220. DOI: 10.15593/perm.mech/2014.4.08