



ВЕСТНИК ПНИПУ. МЕХАНИКА

№ 1, 2018

PNRPU MECHANICS BULLETIN

<http://vestnik.pstu.ru/mechanics/about/inf/>



DOI 10.15593/perm.mech/2018.1.05

УДК 539.3

НЕОДНОРОДНОСТИ ПОЛЕЙ ДЕФОРМАЦИЙ В ЗЕРНАХ ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ И ЗАДАЧА ЭШЕЛБИ

А.А. Ташкинов, В.Е. Шавшуков

Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь, Россия

О СТАТЬЕ

Получена: 11 декабря 2017 г.
Принята: 23 января 2018 г.
Опубликована: 30 марта 2018 г.

Ключевые слова:

неоднородные деформации, поликристаллы, интегральные уравнения.

АННОТАЦИЯ

Предложен и реализован способ вычисления неоднородных полей деформаций в зернах поликристаллических материалов. Вычисления основаны на разработанном ранее методе решения краевой задачи механики неоднородных поликристаллических тел с помощью оригинального варианта теории возмущений, основанного на аналогиях с квантовой теорией поля. Краевая задача для неоднородных полей деформирования в дифференциальной форме преобразуется в интегральное уравнение для тензора деформаций. Решение интегрального уравнения строится в виде ряда по интенсивности взаимодействия деформаций. Это позволяет интерпретировать неоднородную деформацию в какой-либо точке зерна как суперпозицию макродеформации, обусловленной граничными условиями, и двух составляющих, обусловленных внутризерненным и межзерненным взаимодействием. Показано, что в нетекстурированных поликристаллах, несмотря на дальнедействующий характер упругого взаимодействия, при оценке влияния межзерненного взаимодействия на неоднородность деформаций в выделенном зерне можно ограничиться учетом взаимодействия только с ближайшими и вторыми по удалению зернами-соседями. Вклады от взаимодействия с более далекими зернами взаимно компенсируют друг друга.

Неоднородное в пределах одного зерна поле деформаций аппроксимируется кусочно-постоянной функцией. Для этого каждое зерно разбивается на большое число малых субзерен, в пределах которых поля деформаций принимаются однородными. Такая аппроксимация сводит интегральные уравнения для локальных деформаций к линейным алгебраическим, которые решаются численно. Применение метода к классической задаче вычисления деформаций в сферическом включении, погруженном в неограниченную матрицу, дает решение Эшелби.

На модельных поликристаллах цинка выполнена численная оценка неоднородных деформаций. Вблизи границ сферического зерна экстремальные значения деформаций, обусловленные межзерненным взаимодействием, на 30 % превосходят средние. В материалах с более низкой упругой симметрией зерен концентрация деформаций существенно выше.

© ПНИПУ

© Ташкинов Анатолий Александрович – доктор физико-математических наук, профессор, e-mail: tash@pstu.ru
Шавшуков Вячеслав Евгеньевич – кандидат физико-математических наук, доцент, e-mail: shavshukov@pstu.ru

Anatolii A. Tashkinov – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, e-mail: tash@pstu.ru
Viacheslav E. Shavshukov – CSc in Physical and Mathematical Sciences, Assistant Professor, e-mail: shavshukov@pstu.ru



Эта статья доступна в соответствии с условиями лицензии Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International License (CC BY-NC 4.0)

This work is licensed under a Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International License (CC BY-NC 4.0)

INHOMOGENEITIES IN GRAINS OF POLYCRYSTALLINE MATERIALS AND ESHELBY PROBLEM

A.A. Tashkinov, V.E. Shavshukov

Perm National Research Polytechnic University, Perm, Russian Federation

ARTICLE INFO

Received: 11 December 2017
Accepted: 23 January 2018
Published: 30 March 2018

Keywords:

inhomogeneous strains,
polycrystals, integral equations.

ABSTRACT

The paper presents the method aimed at calculating inhomogeneous strain fields in grains of polycrystalline materials. The calculations are based on the earlier developed method of solving boundary value problem for inhomogeneous polycrystalline bodies by means of the original perturbation theory variant based on analogies with the quantum fields theory. The boundary value problem for inhomogeneous strain fields in a differential form transforms into the integral equation for strains tensor. The solution of the integral equation is formed as a series upon the intensity of strains interaction. This allows interpreting inhomogeneous strain at any point in a grain as a superposition of macrostrain, caused by boundary conditions and two components conditioned by intragrain and intergrain interaction. It is shown that in untextured polycrystals, despite the long range type of elastic interaction, one can take into account the interaction only with the nearest and second neighbor grains to evaluate how the intergrain interaction influences the inhomogeneity in the given grain. The contributions of interactions with farther grains mutually annihilate each other.

The strain field inhomogeneous within one grain is approximated by the step-wise constant function. For that, each grain is divided into a great quantity of small subgrains, where subgrain strain fields are supposed to be homogeneous. This approximation reduces the integral equations for local strains into linear algebraic ones, which are solved numerically. The application of this method to a classical problem related to calculating strains in a spherical inclusion embedded into the infinite matrix gives Eshelby solution.

The numerical evaluation of strain inhomogeneities is made using model zinc polycrystals. Close to boundaries in spherical grains the extreme strain values, caused by intergrain interaction, surpass mean strain values by 30 percent. The strains concentration is much higher in materials with a lower elastic symmetry of grains.

© PNRPU

Введение

Поликристаллические материалы являются в упругом отношении существенно неоднородными на мезоскопическом масштабе. Вследствие этого поля мезодеформаций также существенно неоднородны. Эта неоднородность является причиной локального характера многих механических процессов в поликристаллах, таких как зарождение хрупких трещин, очагов пластического течения и других, инициируемых в зернах с максимальными значениями напряжений или деформаций. Учет неоднородностей является центральным пунктом современного локального подхода к проблемам хрупкого, пластического и усталостного деформирования и разрушения материалов [1–4]. Это обуславливает важность оценок величин неоднородностей.

Проблема неоднородности полей деформаций и напряжений в поликристаллических материалах имеет давнюю историю. Первые модели поликристаллов, с успехом применяемые и в настоящее время, – модели Фойгта [5] и Ройсса [6]. В модели Фойгта деформации принимаются однородными в пределах всего поликристаллического тела, а напряжения однородны в пределах зерна, но испытывают скачок при переходе от зерна к зерну. В модели Ройсса напряжения однородны по всему поликристаллическому телу, а деформации однородны в пределах зерна, но скачкообразно изменяются при переходе границ зерен. Более поздние модели, такие как корреляционное, сингу-

лярное и самосогласованное приближения в теории неоднородных материалов [7], уточняют модели Фойгта и Ройсса в количественном отношении, но оставляют неизменным положение об однородности полей внутри индивидуальных зерен. Эти модели дают достаточно точные оценки средних деформаций и их дисперсий в отдельных зернах. Поэтому они приводят к хорошим результатам в вычислении эффективных упругих свойств материалов, связывающих средние напряжения и деформации, и успешно применяются во многих прикладных вопросах механики. Однако даже из общих соображений уравновешенности напряжений на границах зерен и совместности деформаций следует [8], что поля напряжений и деформаций должны быть переменны внутри зерен и необходима количественная оценка степени их неоднородности, а также влияния на эту неоднородность различных параметров микроструктуры поликристаллов.

Неоднородность деформаций в поликристаллах в рамках континуальной механики деформируемого твердого тела можно рассматривать на нескольких масштабных уровнях – от макроскопического (масштаб размеров тела) до микроскопического (масштаб размеров дислокаций). Объединение моделей поведения материалов на разных масштабах составляет суть многоуровневого подхода в механике материалов [9–14]. Многие явления хорошо описываются двухуровневыми моделями, оперирующими только с макро- и мезодеформациями. Настоящая работа посвящена исследованию неоднородностей мезодеформаций в пределах индивидуальных зерен, влияния окру-

жающей зерно микроструктуры на поле деформаций в зерне, поиск конфигураций микроструктуры, приводящих к экстремальным деформациям и оценке этих экстремальных значений деформаций.

Гипотетически исчерпывающее описание неоднородных деформаций в поликристаллах дает метод прямого компьютерного моделирования. Метод широко применяется в современном вычислительном материаловедении [15, 16]. Основным дискуссионным моментом в этом подходе является размер компьютерной модели материала (измеряемый количеством структурных элементов-зерен в модели), позволяющий адекватно описывать механическое поведение макроскопических образцов поликристаллических материалов, и статистическая достаточность метода. Доступные для реализации на современных компьютерах прямые модели содержат несколько сотен зерен. Реальные макрообразцы содержат миллионы зерен. Размер компьютерной модели должен быть во всяком случае намного больше размеров представительного элемента объема поликристалла. Дискуссия о размерах представительного элемента объема продолжается с момента введения концепции Р. Хиллом [17] до настоящего времени [18, 19]. Для вычисления эффективных упругих модулей считается достаточным представительный объем в несколько десятков зерен. Однако для анализа локальных явлений, для которых существен учет неоднородностей деформаций в отдельных зернах, требуемый размер представительного элемента существенно возрастает. В работе [19] отмечается, что в этом случае адекватный размер представительного элемента должен быть в 8–10 раз больше. Соответственно на порядок и более возрастает требуемый размер компьютерной модели, что не доступно для современных компьютеров. Поэтому актуальны альтернативные методы вычисления неоднородных полей деформаций в зернах. В настоящей работе оценки неоднородности упругих деформаций в зернах сделаны с помощью разработанного ранее метода решения краевых задач механики поликристаллов, основанного на аналогиях с квантовой теорией поля [20, 21].

Обычно принимается, что неоднородность полей внутри зерна невелика и ей пренебрегают. Впервые эту гипотезу применил И.М. Лифшиц [22] при вычислении эффективных модулей упругости поликристаллов со слабо анизотропными зернами. В дальнейшем гипотеза однородности получила некоторую теоретическую поддержку в работах Эшелби [23], показавшего, что в сферическом (и в более общем случае – эллипсоидном) зерне, погруженном в однородную среду, поле деформаций однородно. Аналогичные результаты были независимо получены М.А. Кривоглазом [24] и применены для вычисления упругих модулей твердой смеси, где форма отдельных зерен принималась сферической. Несмотря на геометрическую невозможность упаковать сферические зерна в сплошную среду, модель сферических зерен широко применяется в вычислительном материаловедении [25]. Гипотеза однородности в пределах зерен хорошо работает в задачах, где требуется найти только макро-

скопические поля деформирования, то есть осредненные по некоторому представительному объему материала.

Однако даже в сферическом зерне, погруженном в неоднородную среду окружающих зерен, деформации будут неоднородны. Это обусловлено упругим взаимодействием зерен.

1. Теоретико-полевой метод нахождения полей деформаций в зернах поликристалла

В реальных поликристаллических материалах межзеренные границы имеют конечные толщины, в области которых происходит непрерывный переход от кристаллической структуры одного зерна к структуре другого. Поэтому реальные поликристаллы можно считать неоднородными телами с непрерывно изменяющимися по объему свойствами. Для них можно поставить и в принципе решить краевую задачу деформирования в дифференциальной форме в перемещениях. В такой постановке традиционно все полевые переменные задачи (перемещения, деформации, материальные функции и т.д.) разлагают на осредненные и флуктуирующие части:

$$u_i(\vec{r}) = \langle u_i \rangle + u'_i(\vec{r}), \quad \varepsilon_{ij}(\vec{r}) = \langle \varepsilon_{ij} \rangle + \varepsilon'_{ij}(\vec{r}), \\ C_{ijkl}(\vec{r}) = \langle C_{ijkl} \rangle + C'_{ijkl}(\vec{r}),$$

после чего уравнения равновесия в отсутствие объемных сил

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left[C_{ijkl}(\vec{r}) \frac{\partial u_k(\vec{r})}{\partial x_i} \right] = 0 \quad (1)$$

принимают вид

$$\langle C_{ijkl} \rangle \frac{\partial^2 u_k(\vec{r})}{\partial x_j \partial x_i} = - \frac{\partial}{\partial x_j} \left[C'_{ijkl}(\vec{r}) \frac{\partial u_k(\vec{r})}{\partial x_i} \right], \quad (2)$$

где $\langle C_{ijkl} \rangle$ – осредненный по объему тела тензор модулей упругости, а $C'_{ijkl}(\vec{r}) = C_{ijkl}(\vec{r}) - \langle C_{ijkl} \rangle$ – его флуктуации. Решение (2) представляют в виде

$$u_i(\vec{r}) = u_i^*(\vec{r}) + u'_i(\vec{r}), \quad (3)$$

где $u_i^*(\vec{r})$ – решение уравнения (2) с нулевой правой частью, то есть решение соответствующей задачи для однородного тела с осредненными модулями. Граничные условия выбираем в перемещениях

$$u_i(\vec{r})|_{\Gamma} = u_i^{(0)}(\vec{r})|_{\Gamma}, \quad (4)$$

где $u_i^{(0)}(\vec{r})|_{\Gamma}$ – заданная функция на поверхности тела Γ .

В силу сказанного выше все функции считаются непрерывными и дифференцируемыми. После этого осуществляется переход к интегральному уравнению для деформаций, впервые предложенный И.А.Куниным [26] и впоследствии ставший общепринятым [7, 27]

$$\varepsilon_{ij}(\vec{r}) = \varepsilon_{ij}^*(\vec{r}) + \int_V d\vec{r}' g_{ijkl}(\vec{r} - \vec{r}') C'_{klmn}(\vec{r}') \varepsilon_{mn}(\vec{r}'), \quad (5)$$

где $g_{ijkl} = \frac{1}{2}(G_{ik,jl} + G_{jk,il})$ – тензор Грина среды с осредненным по объему тела тензором модулей упругости $\langle C_{ijkl} \rangle$; $G_{ik,jl}$ – вторая производная тензора Кельвина-Соммильяны; $\varepsilon_{ij}^*(\vec{r})$ – решение краевой задачи для однородного тела с осредненными модулями (в общем случае неоднородное). Тензор Грина имеет известный вид [7]

$$g_{ijkl}(\vec{r}) = -\frac{1}{3\langle\mu\rangle} \left[(1-\chi)V_{ijkl} + \left(1 - \frac{2}{5}\chi\right)D_{ijkl} \right] \delta(\vec{r}) + \frac{f_{ijkl}(\vec{r})}{\langle\mu\rangle}, \quad (6)$$

где $\chi = \frac{3\langle K \rangle + \langle \mu \rangle}{3\langle K \rangle + 4\langle \mu \rangle}$ – материальный параметр; $\langle K \rangle$ и $\langle \mu \rangle$ – осредненные модули объемного сжатия и сдвига поликристалла; δ_{ij} – символ Кронекера; V_{ijkl} и D_{ijkl} – шаровая и девiatorная части единичного тензора $I_{ijkl} = \frac{1}{2}(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk})$, а функция $f_{ijkl}(\vec{r})$ зависит от \vec{r} следующим образом:

$$f_{ijkl}(\vec{r}) = \frac{1}{8\pi|\vec{r}|^3} \left[3(n_i n_l \delta_{jk} + n_j n_l \delta_{ik}) - 2I_{ijkl} + \chi(I_{ijkl} + I_{ikjl} + I_{iljk}) - 3\chi - (n_i n_j \delta_{kl} + n_i n_k \delta_{jl} + n_i n_l \delta_{jk} + n_j n_k \delta_{il} + n_j n_l \delta_{ik} + n_k n_l \delta_{ij} - 5n_i n_j n_k n_l) \right], \quad (7)$$

где $n_i = \frac{x_i}{|\vec{r}|}$ – направляющие косинусы радиуса-вектора \vec{r} .

Если в краевой задаче выбрать граничные условия в перемещениях, соответствующие макроскопически однородной глобальной деформаций $u_i(\vec{r})|_{\Gamma} = \varepsilon_{ij}^* x_j$, где ε_{ij}^* – макродеформация, то первый член в правой части (6) – решение соответствующей однородной задачи – будет равен просто константе ε_{ij}^* . В дальнейшем будет рассматриваться именно этот случай.

Поле глобальных неоднородных деформаций в поликристаллическом теле $\varepsilon_{ij}(\vec{r})$ имеет область определения весь объем тела V , включая области межзеренных границ, в которых глобальное поле может иметь большие градиенты, обусловленные резким изменением свойств при переходе от одного зерна к другому. Однако интегральное уравнение (5) не содержит производных от деформаций. Поэтому вклад областей межзеренных границ пропорционален объему границ. Для конструкционных поликристаллических материалов толщина межзеренных границ имеет порядок одного нанометра, при среднем диаметре зерен – несколько десятков микрометров. По-

этому в (5) можно при интегрировании устремить объем межфазных границ к нулю. Поля деформаций внутри зерен обозначим $\varepsilon_{ij}^{(\xi)}(\vec{r})$, областями их определения являются объемы зерен ω_ξ . Объемы зерен считаются намного меньше объема тела, которое в этом отношении может полагаться неограниченно большим.

Для поликристаллического тела разложим все глобальные поля на сумму локальных с помощью индикаторных функций $\lambda_\xi(\vec{r})$, равных единице внутри зерна и нулю вне зерна (N – полное число зерен в поликристаллическом теле):

$$\varepsilon_{ij}(\vec{r}) = \sum_{\xi=1}^N \lambda_\xi(\vec{r}) \varepsilon_{ij}^{(\xi)}(\vec{r}), \quad C_{ijmn}(\vec{r}) = \sum_{\xi=1}^N \lambda_\xi(\vec{r}) C_{ijmn}^{(\xi)}(\vec{r}). \quad (8)$$

Тогда уравнение для глобальных полей (5) сводится к системам уравнений для локальных взаимодействующих полей $\varepsilon_{ij}^{(\xi)}(\vec{r})$ [21],

$$\varepsilon_{ij}^{(\xi)}(\vec{r}_\xi) = \varepsilon_{ij}^* + \int_{\omega_\xi} d\vec{r}'_\xi g_{ijkl}(\vec{r}_\xi - \vec{r}'_\xi) C'_{klmn}(\vec{r}'_\xi) \varepsilon_{mn}^{(\xi)}(\vec{r}'_\xi) + \sum_{\eta \neq \xi, \omega_\eta} \int d\vec{r}'_\eta g_{ijkl}(\vec{r}_\xi - \vec{r}'_\eta) C'_{klmn}(\vec{r}'_\eta) \varepsilon_{mn}^{(\eta)}(\vec{r}'_\eta), \quad (9)$$

где $C'_{klmn} \equiv C_{klmn}^{(\xi)} - \langle C_{klmn} \rangle$ – постоянный тензор в пределах ξ -го зерна.

Второе слагаемое в правой части описывает внутризеренное взаимодействие деформаций, третье – межзеренное взаимодействие. Оба типа взаимодействий вносят вклад в неоднородность деформаций в зерне и убывают с расстоянием. Принимая межзеренное взаимодействие за возмущение и разлагая по нему решение (3) в ряд по поправкам различного порядка

$$\varepsilon_{ij}^{(\xi)}(\vec{r}_\xi) = \varepsilon_{ij}^{(0)(\xi)}(\vec{r}_\xi) + \varepsilon_{ij}^{(1)(\xi)}(\vec{r}_\xi) + \varepsilon_{ij}^{(2)(\xi)}(\vec{r}_\xi) + \varepsilon_{ij}^{(3)(\xi)}(\vec{r}_\xi) + \dots, \quad (10)$$

получим следующую бесконечную систему уравнений для поправок:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{ij}^{(0)(\xi)}(\vec{r}_\xi) - \int_{\omega_\xi} d\vec{r}'_\xi g_{ijkl}(\vec{r}_\xi - \vec{r}'_\xi) C'_{klmn}(\vec{r}'_\xi) \varepsilon_{mn}^{(0)(\xi)}(\vec{r}'_\xi) &= \varepsilon_{ij}^*, \\ \varepsilon_{ij}^{(1)(\xi)}(\vec{r}_\xi) - \int_{\omega_\xi} d\vec{r}'_\xi g_{ijkl}(\vec{r}_\xi - \vec{r}'_\xi) C'_{klmn}(\vec{r}'_\xi) \varepsilon_{mn}^{(1)(\xi)}(\vec{r}'_\xi) &= \\ = \sum_{\eta \neq \xi, \omega_\eta} \int d\vec{r}'_\eta g_{ijkl}(\vec{r}_\xi - \vec{r}'_\eta) C'_{klmn}(\vec{r}'_\eta) \varepsilon_{mn}^{(0)(\eta)}(\vec{r}'_\eta), \\ \varepsilon_{ij}^{(2)(\xi)}(\vec{r}_\xi) - \int_{\omega_\xi} d\vec{r}'_\xi g_{ijkl}(\vec{r}_\xi - \vec{r}'_\xi) C'_{klmn}(\vec{r}'_\xi) \varepsilon_{mn}^{(2)(\xi)}(\vec{r}'_\xi) &= \\ = \sum_{\eta \neq \xi, \omega_\eta} \int d\vec{r}'_\eta g_{ijkl}(\vec{r}_\xi - \vec{r}'_\eta) C'_{klmn}(\vec{r}'_\eta) \varepsilon_{mn}^{(1)(\eta)}(\vec{r}'_\eta), \\ \varepsilon_{ij}^{(3)(\xi)}(\vec{r}_\xi) - \int_{\omega_\xi} d\vec{r}'_\xi g_{ijkl}(\vec{r}_\xi - \vec{r}'_\xi) C'_{klmn}(\vec{r}'_\xi) \varepsilon_{mn}^{(3)(\xi)}(\vec{r}'_\xi) &= \\ = \sum_{\eta \neq \xi, \omega_\eta} \int d\vec{r}'_\eta g_{ijkl}(\vec{r}_\xi - \vec{r}'_\eta) C'_{klmn}(\vec{r}'_\eta) \varepsilon_{mn}^{(2)(\eta)}(\vec{r}'_\eta) \end{aligned} \quad (11)$$

..... и т.д.

Решение нулевого порядка, получаемое из первого уравнения в (11), соответствует учету внутризеренного взаимодействия и пренебрежению межзеренным взаимодействием. Но даже оно не может быть найдено точно и требует применения приближенных методов.

В пределах одного индивидуального зерна поликристалла неоднородное поле деформаций непрерывно, так как материал внутри зерна однороден, за исключением, быть может, границ зерен, где возможны сингулярности в угловых точках. Заменяем непрерывное поле (по крайней мере вдали от границ зерна) кусочно-постоянной аппроксимацией. Для этого разобьем каждое зерно поликристалла на достаточно большое количество субзерен малых размеров, так чтобы деформации в пределах каждого субзерна можно было считать однородными. Тогда каждое зерно исходного поликристаллического тела будет представлено в виде агрегата взаимодействующих субзерен.

В силу отмеченного выше интенсивность взаимодействия субзерен из разных зерен меньше интенсивности взаимодействия субзерен внутри одного зерна. Поэтому сначала рассмотрим нулевое приближение по межзеренному взаимодействию и примем во внимание только внутризеренные взаимодействия деформаций, то есть пренебрежем в (9) всеми членами под знаком суммы.

2. Нулевое приближение по межзеренному взаимодействию. Задача Эшелби

Исходное интегральное уравнение (9) для деформаций в ξ -м зерне в нулевом приближении по межзеренному взаимодействию принимает вид

$$\varepsilon_{ij}^{(0)(\xi)}(\vec{r}_\xi) = \varepsilon_{ij}^* + \int_{\omega_\xi} d\vec{r}'_\xi g_{ijkl}(\vec{r}_\xi - \vec{r}'_\xi) C'_{klmn}(\xi) \varepsilon_{mn}^{(0)(\xi)}(\vec{r}'_\xi). \quad (12)$$

Полевую переменную $\varepsilon_{ij}^{(0)(\xi)}(\vec{r}_\xi)$ в этом уравнении разлагаем с помощью индикаторных функций субзерен (их будем нумеровать латинскими строчными буквами (a, b, \dots), греческими буквами – зерна) на сумму значений в субзернах по образцу

$$\varepsilon_{ij}^{(0)(\xi)}(\vec{r}_\xi) = \sum_{a=1}^n \lambda_a(\vec{r}_\xi) \varepsilon_{ij}^{(0)(\xi)(a)}(\vec{r}_\xi). \quad (13)$$

При этом объем ξ -го зерна равен сумме объемов субзерен $\omega_\xi = \sum_{a=1}^n \omega_a$, где n – число субзерен в зерне. После подстановки индикаторных разложений в интегральное уравнение (12) получим систему интегральных уравнений для деформаций $\varepsilon_{ij}^{(0)(\xi)(a)}(\vec{r}_\xi)$ в субзернах ξ -го зерна, которая по структуре аналогична вышеприведенной системе (9) для деформаций в зернах без разбиения на субзерна,

$$\varepsilon_{ij}^{(0)(\xi)(a)}(\vec{r}_a) = \varepsilon_{ij}^* + \int_{\omega_a} d\vec{r}'_a g_{ijkl}(\vec{r}_a - \vec{r}'_a) C'_{klmn}(\xi) \varepsilon_{mn}^{(0)(\xi)(a)}(\vec{r}'_a) + \sum_{b \neq a} \int_{\omega_b} d\vec{r}'_b g_{ijkl}(\vec{r}_a - \vec{r}'_b) C'_{klmn}(\xi) \varepsilon_{mn}^{(0)(\xi)(b)}(\vec{r}'_b). \quad (14)$$

Отличие состоит в том, что все уравнения в этой системе содержат один и тот же тензор модулей упругости. Далее применяем к ней теорию возмущений по межсубзеренному взаимодействию внутри зерна [21] и получаем следующую цепочку уравнений для поправок различных порядков:

$$\begin{aligned} & \varepsilon_{ij}^{(0)(\xi)(a)(0)}(\vec{r}_a) - \\ & - \int_{\omega_a} d\vec{r}'_a g_{ijkl}(\vec{r}_a - \vec{r}'_a) C'_{klmn}(\xi) \varepsilon_{mn}^{(0)(\xi)(a)(0)}(\vec{r}'_a) = \varepsilon_{ij}^*, \\ & \varepsilon_{ij}^{(0)(\xi)(a)(1)}(\vec{r}_\xi) - \\ & - \int_{\omega_a} d\vec{r}'_a g_{ijkl}(\vec{r}_a - \vec{r}'_a) C'_{klmn}(\xi) \varepsilon_{mn}^{(0)(\xi)(a)(1)}(\vec{r}'_a) = \\ & = \sum_{b \neq a} \int_{\omega_b} d\vec{r}'_b g_{ijkl}(\vec{r}_a - \vec{r}'_b) C'_{klmn}(\xi) \varepsilon_{mn}^{(0)(\xi)(b)(0)}(\vec{r}'_b), \\ & \varepsilon_{ij}^{(0)(\xi)(a)(2)}(\vec{r}_a) - \\ & - \int_{\omega_a} d\vec{r}'_a g_{ijkl}(\vec{r}_a - \vec{r}'_a) C'_{klmn}(\xi) \varepsilon_{mn}^{(0)(\xi)(a)(2)}(\vec{r}'_a) = \quad (15) \\ & = \sum_{b \neq a} \int_{\omega_b} d\vec{r}'_b g_{ijkl}(\vec{r}_a - \vec{r}'_b) C'_{klmn}(\xi) \varepsilon_{mn}^{(0)(\xi)(b)(1)}(\vec{r}'_b), \\ & \varepsilon_{ij}^{(0)(\xi)(a)(3)}(\vec{r}_a) - \\ & - \int_{\omega_a} d\vec{r}'_a g_{ijkl}(\vec{r}_a - \vec{r}'_a) C'_{klmn}(\xi) \varepsilon_{mn}^{(0)(\xi)(a)(3)}(\vec{r}'_a) = \\ & = \sum_{b \neq a} \int_{\omega_b} d\vec{r}'_b g_{ijkl}(\vec{r}_a - \vec{r}'_b) C'_{klmn}(\xi) \varepsilon_{mn}^{(0)(\xi)(b)(2)}(\vec{r}'_b), \\ & \dots \dots \dots \text{и т.д.}, \end{aligned}$$

где $a, b = 1, 2, \dots, n$.

Полное решение исходного уравнения (15) равно сумме всех поправок,

$$\varepsilon_{ij}^{(0)(\xi)(a)}(\vec{r}_a) = \varepsilon_{ij}^{(0)(\xi)(a)(0)}(\vec{r}_a) + \varepsilon_{ij}^{(0)(\xi)(a)(1)}(\vec{r}_a) + \varepsilon_{ij}^{(0)(\xi)(a)(2)}(\vec{r}_a) + \varepsilon_{ij}^{(0)(\xi)(a)(3)}(\vec{r}_a) + \dots \quad (16)$$

В верхних индексах первый цифровой значок (0) означает принадлежность к нулевому приближению по межзеренному взаимодействию, а последний цифровой значок – (0), (1), (2) и т.д. – порядок приближения по межсубзеренному взаимодействию внутри нулевого приближения по межзеренному взаимодействию. Положим размер субзерен бесконечно малым, тогда решение (16), будучи гипотетически найденным, дало бы значение деформации в любой точке зерна, то есть непрерывное распределение деформаций в зерне. Для практических вычислений размеры субзерен выбираются малыми, но конечными.

Далее применяем гипотезу однородности деформаций в пределах отдельных субзерен. Тогда неизвестные деформации в субзернах во всех уравнениях выносятся из-под интегралов, что сводит интегральные уравнения к линейным алгебраическим уравнениям для деформаций в субзернах всех зерен

$$\begin{aligned}
 [I_{ijkl} - B_{ijkl}^{(aa)(\xi)}] \varepsilon_{kl}^{(0)(\xi)(a)(0)} &= \varepsilon_{ij}^*, \\
 [I_{ijkl} - B_{ijkl}^{(aa)(\xi)}] \varepsilon_{kl}^{(0)(\xi)(a)(1)} &= \sum_{b \neq a} B_{ijkl}^{(ab)(\xi)} \varepsilon_{kl}^{(0)(\xi)(b)(0)}, \\
 [I_{ijkl} - B_{ijkl}^{(aa)(\xi)}] \varepsilon_{kl}^{(0)(\xi)(a)(2)} &= \sum_{b \neq a} B_{ijkl}^{(ab)(\xi)} \varepsilon_{kl}^{(0)(\xi)(b)(1)}, \\
 [I_{ijkl} - B_{ijkl}^{(aa)(\xi)}] \varepsilon_{kl}^{(0)(\xi)(a)(3)} &= \sum_{b \neq a} B_{ijkl}^{(ab)(\xi)} \varepsilon_{kl}^{(0)(\xi)(b)(2)},
 \end{aligned} \tag{17}$$

и т.д., $a = 1, 2, \dots, n$,

где

$$\begin{aligned}
 B_{ijmn}^{(aa)(\xi)} &\equiv \int_{\omega_a} d\vec{r}'_a g_{ijkl}(\vec{r}_a - \vec{r}'_a) \cdot C'_{klmn}(\xi), \\
 B_{ijmn}^{(ab)(\xi)} &\equiv \int_{\omega_b} d\vec{r}'_b g_{ijkl}(\vec{r}_a - \vec{r}'_b) \cdot C'_{klmn}(\xi) \quad (a \neq b)
 \end{aligned} \tag{18}$$

есть постоянные тензорные коэффициенты, описывающие взаимодействие деформаций внутри одного субзерна и между субзернами соответственно. Всего (17) содержит $n \cdot N$ систем линейных уравнений размерностью 6×6 для шести компонент деформаций во всех субзернах всего поликристалла.

Первые уравнения в (17) для поправок нулевого порядка для всех субзерен независимы друг от друга, так что поправки нулевого порядка определяются параметрами только рассматриваемого субзерна.

Коэффициенты $B_{ijkl}^{(ab)}$ безразмерны и уменьшаются с увеличением расстояния между субзернами. Они вычисляются численным интегрированием для каждой конкретной микроструктуры поликристаллического материала. Вычисления показывают, что даже для соседних субзерен их величина по модулю порядка 0,02 и меньше. Поэтому итерационная процедура (17) по взаимодействию быстро сходится. Ограничимся поправками первого порядка по межсубзеренному взаимодействию, то есть примем

$$\varepsilon_{ij}^{(0)(\xi)(a)} \approx \varepsilon_{ij}^{(0)(\xi)(a)(0)} + \varepsilon_{ij}^{(0)(\xi)(a)(1)}. \tag{19}$$

Тогда в бесконечной цепочке (18) останется два первых уравнения

$$[I_{ijkl} - B_{ijkl}^{(aa)}] \varepsilon_{kl}^{(0)(\xi)(a)(0)} = \varepsilon_{ij}^*, \tag{20}$$

$$[I_{ijkl} - B_{ijkl}^{(aa)}] \varepsilon_{kl}^{(0)(\xi)(a)(1)} = \sum_{b \neq a} B_{ijkl}^{(ab)} \varepsilon_{kl}^{(0)(\xi)(b)(0)}.$$

Выберем форму и размеры всех субзерен одинаковыми. В этом случае решения нулевого порядка для всех субзерен будут совпадать $\varepsilon_{ij}^{(0)(\xi)(a)(0)} = \varepsilon_{ij}^{(0)(\xi)(b)(0)}$, и в правой части второго уравнения в (20) их можно вынести за знак суммы. В результате система зацепляющихся по субзернам уравнений (20) распадается на системы независимых уравнений для поправок в каждом субзерне по отдельности

$$[I_{ijkl} - B_{ijkl}^{(aa)}] \varepsilon_{kl}^{(0)(\xi)(a)(0)} = \varepsilon_{ij}^*,$$

$$[I_{ijkl} - B_{ijkl}^{(aa)}] \varepsilon_{kl}^{(0)(\xi)(a)(1)} = \tilde{B}_{ijkl}^{(a)} \varepsilon_{kl}^{(0)(\xi)(a)(0)}, \tag{21}$$

содержащих неизвестные только для одного субзерна и новый коэффициент взаимодействия выделенного субзерна со всем остальным объемом зерна

$$\tilde{B}_{ijmn}^{(a)} \equiv \int_{\omega-a} d\vec{r}' g_{ijkl}(\vec{r}_a - \vec{r}') \cdot C'_{klmn}, \tag{22}$$

где область интегрирования, обозначенная как $(\omega - a)$, равна $(\omega_\xi - \omega_a)$.

Коэффициенты в уравнениях (21) определяются параметрами a -го субзерна, его положением в зерне и параметрами зерна в целом. Особенностью (21) является то, что дискретным образом выступает только a -е субзерно. Остальные субзерна входят интегрально. Разбиение остальной части зерна на субзерна становится несущественным, так как все остальные субзерна включены в интеграл (22) в качестве единой области интегрирования. Это позволяет выбрать объем a -го субзерна в виде шара. Ниже будет показано, что для шарового субзерна коэффициенты $B_{ijkl}^{(aa)}$ не зависят от его радиуса, так что можно устремить радиус шарового субзерна к нулю и получить решение для деформаций в точке, то есть практически получить решение для непрерывного поля деформаций в зерне. Выражение (21) – системы линейных уравнений размерностью 6×6 , которые решаются численными методами линейной алгебры.

Дальнейшие вычисления требуют конкретизации формы и упругих свойств зерен, иными словами, микроструктуры поликристалла. Примем форму всех зерен сферической и одинакового объема. Деформацию в некоторой точке зерна с координатами \vec{r}_a аппроксимируем деформацией в центре a -го субзерна сферической формы малого радиуса.

Коэффициент взаимодействия $B_{ijmn}^{(aa)}$ для сферического субзерна вычисляется аналитически в общем виде. В интеграле (18) для $B_{ijmn}^{(aa)}$

$$B_{ijmn}^{(aa)} \equiv \int_{\omega_a} d\vec{r}'_a g_{ijkl}(\vec{r}_a - \vec{r}'_a) \cdot C'_{klmn}$$

начало координат поместим в центр субзерна ($\vec{r}_a = 0$). Подставляя выражение для тензора Грина и производя интегрирование по угловым координатам, убеждаемся, что интегралы от функции $f_{ijkl}(\vec{r})$ в (7) обращаются в ноль, и в итоге получаем

$$\begin{aligned}
 B_{ijmn}^{(aa)} &= \\
 &= -\frac{1}{3\langle \mu \rangle} \left[(1 - \chi) V_{ijkl} + \left(1 - \frac{2}{5} \chi\right) D_{ijkl} \right] C'_{klmn}.
 \end{aligned} \tag{23}$$

Коэффициенты взаимодействия $\tilde{B}_{ijmn}^{(a)}$ какого-либо субзерна с остальной областью также вычисляются аналитически. Для этого, учитывая определение тензора

Грина через производные тензора Кельвина-Соммилианы, перепишем выражение (22) в следующем виде:

$$\begin{aligned} \tilde{B}_{ijmn}^{(a)} \equiv & \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_j^{(a)}} \int_{\omega_c} d\vec{r}' G_{ik,l}(\vec{r}_a - \vec{r}') \cdot C'_{klmn} + \\ & + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_i^{(a)}} \int_{\omega_c} d\vec{r}' G_{jk,l}(\vec{r}_a - \vec{r}') \cdot C'_{klmn} - \\ & - \int_{\omega_a} d\vec{r}' \left\{ -\frac{1}{3\langle\mu\rangle} \left[(1-\chi) V_{ijkl} + \right. \right. \\ & \left. \left. + (1-\frac{2}{5}\chi) D_{ijkl} \right] \delta(\vec{r}_a - \vec{r}') \right\} C'_{klmn}, \end{aligned} \quad (24)$$

где $G_{ik,l}$ и $G_{jk,l}$ – первые производные тензора Кельвина-Соммилианы [7],

$$G_{ik,l}(\vec{r}) = -\frac{1}{8\pi\langle\mu\rangle|\vec{r}|^2} \times [3\chi n_i n_k n_l + 2\delta_{ik} n_l - \chi(n_i \delta_{kl} + n_k \delta_{il} + n_l \delta_{ik})]. \quad (25)$$

Интегрирование в первых двух интегралах (24) производится по всей области ξ -го зерна, а в третьем интеграле только по области a -го субзерна. Третий интеграл устраняет слагаемое с δ -функцией в (6), которое возникает при выполнении дифференцирования в (24), но не входит в исходное выражение (22) для $\tilde{B}_{ijmn}^{(a)}$, так как в нем всюду $\vec{r}_a \neq \vec{r}'$ и δ -функция обращается в ноль.

Рассмотрим первый интеграл в (24) и сделаем в нем замену переменных интегрирования $\vec{r}_a - \vec{r}' = \vec{r}$,

$$\int_{\omega_c} d\vec{r}' G_{ik,l}(\vec{r}_a - \vec{r}') = - \int_{\omega_c} d\vec{r} G_{ik,l}(\vec{r}). \quad (26)$$

Он вычисляется методом, использованным Эшелби для подобного интеграла в работе 1957 г. [23]. Запишем его в сферических координатах r, θ, φ . Начало координат поместим в центр a -го субзерна, то есть $\vec{r}_a = 0$. Область интегрирования по \vec{r} есть вся шаровая область на рис. 1.

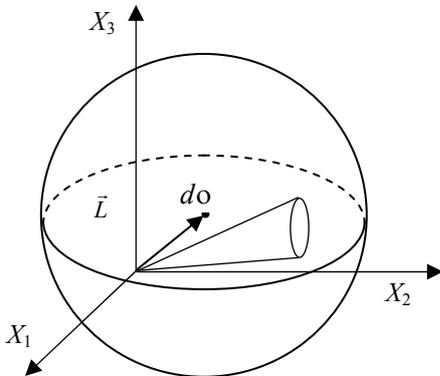


Рис. 1. Сферическое зерно и область интегрирования в (26)

Fig. 1. Spherical grain and integration area

На рисунке $\vec{L} = (L_1, L_2, L_3)$ – радиус-вектор, проведенный из начала координат в центр зерна. Верхний

предел интегрирования по радиусу $r(\vec{n})$, зависящий от направления \vec{n} (от углов θ, φ), есть точка пересечения направления \vec{n} и границы зерна, задаваемой уравнением сферы (в декартовых координатах)

$$\left(\frac{x_1 - L_1}{R}\right)^2 + \left(\frac{x_2 - L_2}{R}\right)^2 + \left(\frac{x_3 - L_3}{R}\right)^2 = 1.$$

Легко видеть, что верхний предел интегрирования находится из квадратного уравнения

$$r^2 - 2(\vec{n}\vec{L})r - R^2 + L^2 = 0.$$

Из условия положительности $r \geq 0$ оставляем один корень уравнения

$$r(\vec{n}) = (\vec{n}\vec{L}) + \sqrt{(\vec{n}\vec{L})^2 + R^2 - L^2}.$$

Производя в (26) сначала интегрирование по радиусу, получим

$$\begin{aligned} \int_{\omega_c} d\vec{r} G_{ik,l}(\vec{r}) = & \frac{1}{8\pi\langle\mu\rangle} \int d\omega \left[(\vec{n}\vec{L}) + \sqrt{(\vec{n}\vec{L})^2 + R^2 - L^2} \right] \times \\ & \times [3\chi n_i n_k n_l + 2\delta_{ik} n_l - \chi(n_i \delta_{kl} + n_k \delta_{il} + n_l \delta_{ik})], \end{aligned}$$

где ω – телесный угол, $d\omega = \sin\theta d\theta d\varphi$, а интегрирование производится по всему телесному углу вокруг начала координат. Слагаемое с квадратным корнем исчезает в силу нечетности функции в правых квадратных скобках, и остаются только табличные интегралы от произведений направляющих косинусов

$$\begin{aligned} \int_{\omega_a} d\vec{r} G_{ik,l}(\vec{r}) = & \frac{1}{8\pi\langle\mu\rangle} \int d\omega \cdot (\vec{n}\vec{L}) [3\chi n_i n_k n_l + \\ & + 2\delta_{ik} n_l - \chi(n_i \delta_{kl} + n_k \delta_{il} + n_l \delta_{ik})]. \end{aligned} \quad (27)$$

Теперь в (27) возвращаемся к переменной \vec{r}_a и, замечая, что

$$\frac{\partial}{\partial x_j^{(a)}} = -\frac{\partial}{\partial L_j},$$

получаем

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_j^{(a)}} \int_{\omega_c} d\vec{r}' G_{ik,l}(\vec{r}_a - \vec{r}') = & -\frac{1}{8\pi\langle\mu\rangle} \int d\omega \cdot n_j \times \\ & \times [3\chi n_i n_k n_l + 2\delta_{ik} n_l - \chi(n_i \delta_{kl} + n_k \delta_{il} + n_l \delta_{ik})] = \\ = & -\frac{1}{\langle\mu\rangle} \left[\left(1 - \frac{1}{3}\chi\right) V_{ijkl} - \frac{2}{15}\chi D_{ijkl} \right], \end{aligned} \quad (28)$$

аналогично для второго слагаемого в (24)

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_i^{(a)}} \int_{\omega_c} d\vec{r}' G_{jk,l}(\vec{r}_a - \vec{r}') = & -\frac{1}{8\pi\langle\mu\rangle} \int d\omega \cdot n_i \times \\ & \times [3\chi n_j n_k n_l + 2\delta_{jk} n_l - \chi(n_j \delta_{kl} + n_k \delta_{jl} + n_l \delta_{jk})] = \\ = & -\frac{1}{\langle\mu\rangle} \left[\left(1 - \frac{1}{3}\chi\right) V_{ijlk} - \frac{2}{15}\chi D_{ijlk} \right]. \end{aligned} \quad (29)$$

Вычисляя полусумму интегралов (28) и (29), убеждаемся, что она в точности равна третьему интегралу в (24) с противоположным знаком. Поэтому для сферических зерен все коэффициенты взаимодействия какого-либо субзерна с остальной частью зерна обращаются в ноль,

$$\tilde{B}_{ijmn}^{(a)} = 0. \quad (30)$$

Из (21) следует, что поправки 1-го порядка по межсубзеренному взаимодействию обращаются в ноль, и далее из (17) следует, что все поправки высших порядков также обращаются в ноль. Деформации во всех субзернах зерна оказываются одинаковыми $\varepsilon_{ij}^{(a)} = \varepsilon_{ij}^{(0)(a)} = \varepsilon_{ij}^{(0)(\xi)}$ и определяются из одной системы линейных уравнений

$$\left\{ I_{ijmn} + \frac{1}{3\langle\mu\rangle} \left[(1-\chi)V_{ijkl} + \left(1 - \frac{2}{5}\chi\right)D_{ijkl} \right] C'_{klmn} \right\} \varepsilon_{mn}^{(a)} = \varepsilon_{ij}^*. \quad (31)$$

Таким образом в сферическом зерне в нулевом приближении по межзеренному взаимодействию деформации однородны. При переходе к соседнему зерну деформации испытывают скачок вследствие скачкообразной смены в (31) $C'_{klmn} \equiv C_{klmn}^{(\xi)} - \langle C_{klmn} \rangle$, вызванной поворотом кристаллографических осей зерен.

Нулевое приближение по межзеренному взаимодействию имеет особое значение в связи с задачей Эшелби. Применим изложенный формализм к одиночному включению сферической формы, погруженному в неограниченную матрицу. В качестве включения возьмем ξ -е зерно с тензором модулей упругости $C_{ijkl}^{(incl)}$. Все остальные (η -е) зерна выберем одинаковыми с тензором модулей упругости матрицы $C_{ijkl}^{(matr)}$, так что они составят неограниченную однородную матрицу. Тогда нужно положить $\langle C_{ijkl} \rangle = C_{ijkl}^{(matr)}$, так как объемная доля одиночного включения ничтожно мала. Легко видеть, что в правых частях точных уравнений в (11), начиная со второго, остаются нули, так как в них $C_{ijkl}^{(\eta)} \equiv C_{ijkl}^{(\eta)} - \langle C_{ijkl} \rangle = C_{ijkl}^{(matr)} - C_{ijkl}^{(matr)} = 0$. После этого, сложив все уравнения (11), получим, что поле деформаций внутри включения $\varepsilon_{ij}^{(incl)}(\vec{r})$ определяется из одного точно уравнения

$$\varepsilon_{ij}^{(incl)}(\vec{r}) - \int_{\omega_{incl}} d\vec{r}' g_{ijkl}(\vec{r} - \vec{r}') \times \times (C_{klmn}^{(incl)} - C_{klmn}^{(matr)}) \varepsilon_{mn}^{(incl)}(\vec{r}') = \varepsilon_{ij}^*. \quad (32)$$

Таким образом, уравнение (32) есть уравнение задачи Эшелби для поля деформаций внутри сферического включения в матрице.

Разобьем включение на большое число малых субвключений и разложим деформацию $\varepsilon_{ij}^{(incl)}(\vec{r})$ с помощью индикаторных функций на сумму деформаций в субвключениях по типу (13). В силу изложенного выше

все деформации в субвключениях будут одинаковыми, а значит, $\varepsilon_{ij}^{(incl)}(\vec{r})$ однородна внутри включения. Поэтому уравнение (32) сводится к линейному алгебраическому уравнению, совпадающему по форме с (31),

$$\left\{ I_{ijmn} + \frac{1}{3\langle\mu\rangle} \left[(1-\chi)V_{ijkl} + \left(1 - \frac{2}{5}\chi\right)D_{ijkl} \right] (C_{klmn}^{(incl)} - C_{klmn}^{(matr)}) \right\} \varepsilon_{mn}^{(incl)} = \varepsilon_{ij}^*. \quad (33)$$

Уравнение (33) является точным для одиночного включения. Его легко решить численно для любых типов анизотропии включения и матрицы и произвольной взаимной ориентации их кристаллографических осей.

Для изотропных включения и матрицы решение (33) можно получить в общем виде. Полагаем тензоры модулей упругости включения и матрицы равными соответственно

$$C_{ijkl}^{(incl)} = 3K_{incl}V_{ijkl} + 2\mu_{incl}D_{ijkl}, \quad (34)$$

$$C_{ijkl}^{(matr)} = 3K_{matr}V_{ijkl} + 2\mu_{matr}D_{ijkl}, \quad (35)$$

где K и μ – модули объемного сжатия и сдвига включения (incl) и матрицы (matr).

Подставляя (34), (35) в (33), получим

$$\left\{ I_{ijmn} + \frac{1}{3\mu_{matr}} \left[3(1-\chi)(K_{incl} - K_{matr})V_{ijkl} + 2\left(1 - \frac{2}{5}\chi\right)(\mu_{incl} - \mu_{matr})D_{ijkl} \right] \right\} \varepsilon_{kl}^{(incl)} = \varepsilon_{ij}^*. \quad (36)$$

и его решение

$$\varepsilon_{ij}^{(incl)} = \left\{ \frac{1}{1 + \frac{(1-\chi)(K_{incl} - K_{matr})}{\mu_{matr}}} V_{ijkl} + \frac{1}{1 + \frac{2\left(1 - \frac{2}{5}\chi\right)(\mu_{incl} - \mu_{matr})}{3\mu_{matr}}} D_{ijkl} \right\} \varepsilon_{kl}^*. \quad (37)$$

Выражение (37) совпадает с решением Эшелби для деформаций внутри изотропного сферического включения [23, 27].

Уравнение (33), решаемое численно, является обобщением классической задачи Эшелби на случай анизотропного сферического включения в анизотропной матрице.

3. Влияние межзеренного взаимодействия на неоднородность деформаций в зерне

Взаимодействие зерен в поликристалле делает деформации неоднородными даже в сферическом зерне. Окружающая каждое зерно среда, состоящая из других зерен, имеет стохастическое строение. Вследствие этого поле деформаций в фиксированном зерне будет случайным полем. Поэтому влияние межзеренного взаимодействия

нужно рассматривать статистически. Стохастичность структуры обусловлена случайными формами и размерами зерен, а также случайной ориентацией кристаллографических осей зерен. Вычисления проведем на модельном поликристалле со сферическими зернами одинакового объема, схематически изображенном на рис. 2. Рассматриваемое зерно находится в центре и затемнено.

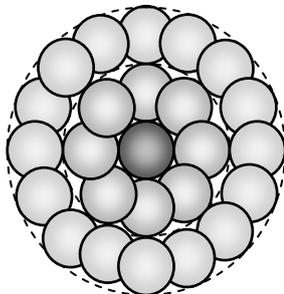


Рис. 2. Модельный поликристалл со сферическими зернами
Fig. 2. Model polycrystal with spherical grains

Статистические свойства поля деформаций в зерне в его кристаллографической системе координат определяются на ансамбле всевозможных ориентаций кристаллографических осей ближайших и всех последующих зерен, окружающих данное зерно.

В [28] исследованы статистические распределения упругих полей в предположении однородности деформаций внутри зерна и построены плотности распределения этих полей. Для неоднородных полей можно применить ту же схему, но уже к каждой точке внутри зерна. Таким образом можно построить непрерывное множество плотностей распределения случайных деформаций для всех точек зерна. Для выяснения степени влияния межзеренного взаимодействия на неоднородность полей деформаций в зернах достаточно рассмотреть несколько характерных точек в зернах.

Необходимо учесть взаимодействие всех субзерен в выделенном ξ -м зерне и взаимодействие этих субзерен со всеми субзернами остальных $\eta \neq \xi$ -х зерен. В точном уравнении (9) разложим полевые переменные во всех зернах на переменные в субзернах,

$$\varepsilon_{ij}^{(\xi)}(\vec{r}_\xi) = \sum_{a=1}^n \lambda_a(\vec{r}_\xi) \varepsilon_{ij}^{(a)(\xi)}(\vec{r}_\xi) \quad (38)$$

$$\varepsilon_{ij}^{(\eta)}(\vec{r}_\eta) = \sum_{e=1}^n \lambda_e(\vec{r}_\eta) \varepsilon_{ij}^{(e)(\eta)}(\vec{r}_\eta),$$

и получим точную систему интегральных уравнений для деформаций во всех субзернах всех зерен

$$\begin{aligned} \varepsilon_{ij}^{(a)(\xi)}(\vec{r}_a) - \int_{\omega_a} d\vec{r}'_a \mathbf{g}_{ijkl}(\vec{r}_a - \vec{r}'_a) C'_{klmn}(\xi) \varepsilon_{mn}^{(a)(\xi)}(\vec{r}'_a) = \\ = \varepsilon_{ij}^* + \sum_{b \neq a} \int_{\omega_b} d\vec{r}'_b \mathbf{g}_{ijkl}(\vec{r}_a - \vec{r}'_b) C'_{klmn}(\xi) \varepsilon_{mn}^{(b)(\xi)}(\vec{r}'_b) + \\ + \sum_{\eta \neq \xi} \sum_{e=1}^n \int_{\omega_e} d\vec{r}'_e \mathbf{g}_{ijkl}(\vec{r}_a - \vec{r}'_e) C'_{klmn}(\eta) \varepsilon_{mn}^{(e)(\eta)}(\vec{r}'_e). \end{aligned} \quad (39)$$

В (38) и (39) индексы a, b нумеруют субзерна в выделенном ξ -м зерне, индекс e нумерует субзерна во всех остальных зернах поликристалла.

Теперь применяем к уравнению (39) теорию возмущений. Все межсубзеренные взаимодействия, то есть оба члена с суммами в правой части, принимаем за возмущение и представляем неизвестные переменные в виде рядов, суммирующих поправки всех порядков,

$$\begin{aligned} \varepsilon_{ij}^{(a,b,e)(\xi,\eta)}(\vec{r}) = \varepsilon_{ij}^{(0)(a,b,e)(\xi,\eta)}(\vec{r}) + \\ + \varepsilon_{ij}^{(1)(a,b,e)(\xi,\eta)}(\vec{r}) + \varepsilon_{ij}^{(2)(a,b,e)(\xi,\eta)}(\vec{r}) + \dots \end{aligned} \quad (40)$$

Поправки находятся из бесконечной цепочки систем уравнений

$$\begin{aligned} \varepsilon_{ij}^{(0)(a)(\xi)}(\vec{r}_a) - \int_{\omega_a} d\vec{r}'_a \mathbf{g}_{ijkl}(\vec{r}_a - \vec{r}'_a) C'_{klmn}(\xi) \varepsilon_{mn}^{(0)(a)(\xi)}(\vec{r}'_a) = \varepsilon_{ij}^*, \\ \varepsilon_{ij}^{(1)(a)(\xi)}(\vec{r}_a) - \int_{\omega_a} d\vec{r}'_a \mathbf{g}_{ijkl}(\vec{r}_a - \vec{r}'_a) C'_{klmn}(\xi) \varepsilon_{mn}^{(1)(a)(\xi)}(\vec{r}'_a) = \\ = \sum_{b \neq a} \int_{\omega_b} d\vec{r}'_b \mathbf{g}_{ijkl}(\vec{r}_a - \vec{r}'_b) C'_{klmn}(\xi) \varepsilon_{mn}^{(0)(b)(\xi)}(\vec{r}'_b) + \\ + \sum_{\eta \neq \xi} \sum_{e=1}^n \int_{\omega_e} d\vec{r}'_e \mathbf{g}_{ijkl}(\vec{r}_a - \vec{r}'_e) C'_{klmn}(\eta) \varepsilon_{mn}^{(0)(e)(\eta)}(\vec{r}'_e) \end{aligned} \quad (41)$$

..... и т.д.

Все деформации полагаются постоянными функциями в пределах субзерен. Указание у них аргументов просто обозначает принадлежность к соответствующему субзерну. Поэтому фактически (41) есть системы линейных алгебраических уравнений. Запишем их в кратком виде с помощью использованных выше обозначений для коэффициентов взаимодействия субзерен

$$\begin{aligned} \varepsilon_{ij}^{(0)(a)(\xi)} - B_{ijkl}^{(aa)(\xi)} \varepsilon_{kl}^{(0)(a)(\xi)} = \varepsilon_{ij}^*, \\ \varepsilon_{ij}^{(1)(a)(\xi)} - B_{ijkl}^{(aa)(\xi)} \varepsilon_{mn}^{(1)(a)(\xi)} = \\ = \sum_{b \neq a} B_{ijkl}^{(ab)(\xi)} \varepsilon_{kl}^{(0)(b)(\xi)} + \sum_{\eta \neq \xi} \sum_{e=1}^n B_{ijkl}^{(ae)(\eta)} \varepsilon_{kl}^{(0)(e)(\eta)} \end{aligned} \quad (42)$$

..... и т.д.,

где коэффициенты

$$\begin{aligned} B_{ijmn}^{(ab)(\xi)} \equiv \int_{\omega_b} d\vec{r}'_b \mathbf{g}_{ijkl}(\vec{r}_a - \vec{r}'_b) \cdot C'_{klmn}(\xi) \\ \text{и } B_{ijmn}^{(ae)(\eta)} \equiv \int_{\omega_e} d\vec{r}'_e \mathbf{g}_{ijkl}(\vec{r}_a - \vec{r}'_e) \cdot C'_{klmn}(\eta) \end{aligned} \quad (43)$$

описывают взаимодействие субзерен в одном зерне и в разных зернах соответственно.

Из (42) видно, что источником неоднородности деформаций в ξ -м зерне является взаимодействие субзерен этого зерна со всеми субзернами поликристалла. Выше отмечалось, что решение в виде ряда теории возмущений (40) по взаимодействию быстро сходится. Поэтому ограничимся поправками 1-го порядка по межсубзеренному взаимодействию, то есть первыми двумя

уравнениями в (42) и (30). Кроме того, для сферических зерен решения нулевого порядка $\varepsilon_{ij}^{(0)(a)(\xi)}$ однородны, поэтому в них можно опустить индекс субзерна $\varepsilon_{ij}^{(0)(a)(\xi)} \equiv \varepsilon_{ij}^{(0)(\xi)}$, а член с одинарной суммой во втором уравнении (42) обращается в нуль. Остается система из двух уравнений

$$\begin{aligned} \varepsilon_{ij}^{(0)(\xi)} - B_{ijkl}^{(aa)(\xi)} \varepsilon_{kl}^{(0)(\xi)} &= \varepsilon_{ij}^*, \\ \varepsilon_{ij}^{(1)(a)(\xi)} - B_{ijkl}^{(aa)(\xi)} \varepsilon_{mn}^{(1)(a)(\xi)} &= \sum_{\eta \neq \xi} \tilde{B}_{ijkl}^{(a\eta)} \varepsilon_{kl}^{(0)(\eta)}, \end{aligned} \quad (44)$$

а новый коэффициент

$$\tilde{B}_{ijmn}^{(a\eta)} \equiv \int_{\omega_\eta} d\vec{r}'_a \mathbf{g}_{ijkl}(\vec{r}_a - \vec{r}'_a) C_{klmn}^{r(\eta)} \quad (45)$$

определяет интенсивность взаимодействия субзерна в ξ -м зерне с η -м зерном в целом. Этот коэффициент зависит от положения субзерна в ξ -м зерне, от взаимного расположения ξ -го и η -го зерен и от ориентации кристаллографических осей этих двух зерен. Таким образом вновь взаимодействие с субзернами других зерен входит в теорию интегрально, то есть фактически разбивать на субзерна достаточно только рассматриваемое конкретное зерно. Неоднородность деформаций в зерне обуславливается только межзеренным взаимодействием.

Заметим, что $\varepsilon_{ij}^{(0)(\eta)}$ в правой части второго уравнения (43) определяется из уравнения $\varepsilon_{ij}^{(0)(\eta)} - B_{ijkl}^{(aa)(\eta)} \varepsilon_{kl}^{(0)(\eta)} = \varepsilon_{ij}^*$, в котором коэффициенты $B_{ijkl}^{(aa)(\eta)}$ определяются выражением $B_{ijmn}^{(aa)(\eta)} \equiv \int_{\omega_a} d\vec{r}'_a \mathbf{g}_{ijkl} \times (\vec{r}_a - \vec{r}'_a) C_{klmn}^{r(\eta)}$, то есть по форме совпадают с ранее найденными коэффициентами (18).

Из линейности системы (44) следует, что межзеренное взаимодействие, описываемое членом с суммой, дает аддитивную добавку к решению предыдущего параграфа. Эта добавка является стохастической. Ясно, что она изменяется в некоторых конечных пределах, и для нее можно построить функцию распределения методом, изложенным в [28]. Для оценки величины неоднородности деформаций, вызванной межзеренным взаимодействием, приведем здесь только маргинальные значения этих добавок на ансамбле всевозможных конфигураций окружения выделенного зерна. Число возможных конфигураций для макроскопического поликристаллического образца чрезвычайно велико. Маргинальные значения для решений (44) реализуются только для некоторого небольшого набора конфигураций из всего ансамбля. Поэтому для поиска маргинальных значений пришлось бы решать систему (44) для очень большой статистической выборки конфигураций ансамбля. Однако аддитивность вкладов взаимодействия с отдельными зернами кардинально сокращает объем вычислительной работы, делая ее доступной для однопроцессорных компьютеров.

Следуя работе [29], разбиваем сумму во втором уравнении (44) по всем η -м зернам на сумму по ближайшим зернам-соседям (1-я координационная сфера содержит 26 зерен), следующим по удалению зернам (2-я координационная сфера содержит 98 зерен), 3-я координационная сфера (216 зерен) и т.д.

$$\begin{aligned} \varepsilon_{ij}^{(1)(a)(\xi)} - B_{ijkl}^{(aa)} \varepsilon_{mn}^{(1)(a)(\xi)} &= \\ = \sum_{\eta \neq \xi}^{1st} \tilde{B}_{ijkl}^{(a\eta)} \varepsilon_{kl}^{(0)(\eta)} + \sum_{\eta \neq \xi}^{2nd} \tilde{B}_{ijkl}^{(a\eta)} \varepsilon_{kl}^{(0)(\eta)} + \dots \end{aligned} \quad (46)$$

Вклады зерен всех координационных сфер аддитивны и могут быть рассмотрены отдельно. Поэтому для нахождения маргинального значения деформации в какой-либо заданной точке (субзерне) рассматриваемого зерна достаточно найти ориентацию кристаллографических осей, дающую максимальный вклад для каждого зерна-соседа по отдельности, а затем просуммировать все вклады. Для каждого зерна-соседа рассматривается статистическая выборка из 10^5 – 10^6 его случайных ориентаций. Уравнения (46) для поправок первого порядка решаются численно для каждой реализации случайного окружения выделенного зерна из этой выборки. Стохастичность для модельного поликристалла сводится к случайной ориентации кристаллографических осей зерен. Случайная ориентация осей каждого зерна задается генератором случайных чисел и специальным распределением углов Эйлера, обеспечивающим равномерность всех ориентаций [см., например, 30]. По массиву 10^5 – 10^6 полученных решений в каждой точке ξ -го зерна выбираются маргинальные значения, обусловленные каждым зерном-соседом по отдельности. Затем маргинальные вклады от всех зерен складываются, что дает экстремальное значение деформации в рассматриваемой точке.

В качестве примера рассмотрим нетекстурированный поликристалл цинка, подвергнутый макроскопической деформации чистого сдвига. Зерна цинка имеют гексагональную упругую симметрию. Упругие свойства монокристалла зерна взяты из [31]. Кристаллографическую ось симметрии 6-го порядка выбранного (ξ -го) зерна направим вдоль оси X_3 глобальной системы координат поликристалла. Диаметр зерна принят равным единице.

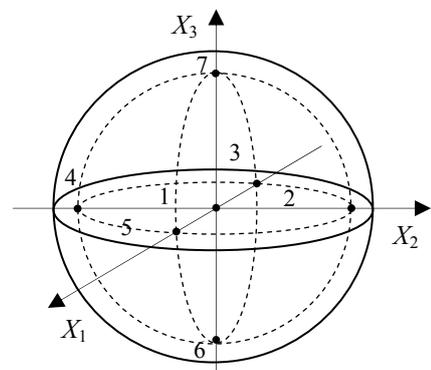


Рис. 3. Характерные точки в зерне
Fig. 3. Characteristic points in grain

Рассмотрим макросдвиг в двух плоскостях X_1X_2 и X_2X_3 , соответствующих в выбранной системе координат максимальной и минимальной жесткости на сдвиг выделенного зерна; $\epsilon_{12}^* = 3 \cdot 10^{-4}$ и $\epsilon_{23}^* = 3 \cdot 10^{-4}$.

Сначала найдем точки возможных максимумов деформаций. Рассмотрим характерные точки, показанные на рис. 3. Максимально удаленные от центра зерна точки находятся на расстоянии 0,45 от центра зерна (для наглядности рисунок сделан не в масштабе). Точки на границе зерна не рассматриваются, так как в упругой постановке в них возможны сингулярности. Предлагаемый метод работает в области, ограниченной штриховыми линиями.

В силу упомянутой аддитивности для нахождения координат точек максимумов достаточно рассмотреть влияние только 26 ближайших соседей. Учет взаимодействия с зернами более удаленных координационных сфер будет увеличивать значения максимальных деформаций, не меняя координаты точек максимумов. Максимальному (или минимальному) значению деформации в каждой точке на рис. 3 будет соответствовать вполне определенная ориентация кристаллографических осей соседних зерен, причем для разных точек такие «экстремальные» ориентации осей соседей будут разные.

Результаты вычислений максимальных положительных деформаций сдвига в выбранных точках зерна $\epsilon_{12}^{(a)(\xi)}(\vec{r}) = \epsilon_{12}^{(0)(\xi)}(\vec{r}) + \epsilon_{12}^{(1)(a)(\xi)}(\vec{r})|_{26}$ при макросдвиге $\epsilon_{12}^* = 3 \cdot 10^{-4}$ в плоскости X_1X_2 и $\epsilon_{23}^{(a)(\xi)}(\vec{r}) = \epsilon_{23}^{(0)(\xi)}(\vec{r}) + \epsilon_{23}^{(1)(a)(\xi)}(\vec{r})|_{26}$ при макросдвиге $\epsilon_{23}^* = 3 \cdot 10^{-4}$ в плоскости X_2X_3 и учете взаимодействия только с ближайшими соседями приведены соответственно в табл. 1 и табл. 2. Для информативности отдельно приведены поправки нулевого порядка и 1-го порядка по взаимодействию.

Таблица 1

Максимальные деформации $\epsilon_{12}^{(a)(\xi)}$ в характерных точках зерна ($\cdot 10^4$)

Table 1

Maximum strains $\epsilon_{12}^{(a)(\xi)}$ at characteristic points of grain ($\cdot 10^4$)

Поправка	Точка						
	1	2	3	4	5	6	7
$\epsilon_{12}^{(0)(\xi)}$	2,469	2,469	2,469	2,469	2,469	2,469	2,469
$\epsilon_{12}^{(1)(a)(\xi)} _{26}$	0,309	0,342	0,335	0,343	0,327	0,362	0,363
$\epsilon_{12}^{(a)(\xi)} = \epsilon_{12}^{(0)(\xi)} + \epsilon_{12}^{(1)(a)(\xi)} _{26}$	2,778	2,811	2,804	2,812	2,796	2,831	2,832

Для обоих случаев наибольшие деформации наблюдаются в точках вблизи границы зерна с абсолютными максимумами в точках 7 и 6 (зенит и надир). Однако различие максимальных значений в разных граничных точках порядка 1 %. Учитывая модельность задачи, можно сказать, что в любой точке зерна вблизи границы может наблюдаться максимально возможное значение деформации. Каждому такому максимальному значе-

нию деформации в какой-либо точке зерна из табл. 1 соответствует вполне определенная конфигурация 26 соседних зерен, различная для разных точек. Разработанный алгоритм фиксирует такие экстремальные ориентации соседних зерен.

Таблица 2

Максимальные деформации $\epsilon_{23}^{(a)(\xi)}$ в характерных точках зерна ($\cdot 10^4$)

Table 2

Maximum strains $\epsilon_{23}^{(a)(\xi)}$ at characteristic points of grain ($\cdot 10^4$)

Поправка	Точка						
	1	2	3	4	5	6	7
$\epsilon_{23}^{(0)(\xi)}$	3,241	3,241	3,241	3,241	3,241	3,241	3,241
$\epsilon_{23}^{(1)(a)(\xi)} _{26}$	0,364	0,381	0,415	0,383	0,413	0,427	0,428
$\epsilon_{23}^{(a)(\xi)} = \epsilon_{23}^{(0)(\xi)} + \epsilon_{23}^{(1)(a)(\xi)} _{26}$	3,605	3,622	3,666	3,624	3,654	3,668	3,669

Для нахождения абсолютного максимума деформации в какой-либо точке нужно учесть взаимодействие с зернами 2-й и последующих координационных сфер. Рассмотрим деформацию в точке 7 на рис. 3. Максимальные вклады от взаимодействия с 98 зернами 2-й координационной сферы в этой точке для двух рассмотренных случаев деформирования, найденные путем отдельного поиска наибольших аддитивных добавок на выборке 10^5-10^6 случайных ориентаций всех зерен по отдельности, равны соответственно $\epsilon_{12}^{(1)(\text{точка } 7)(\xi)}|_{98} = 0,191 \cdot 10^{-4}$ и $\epsilon_{23}^{(1)(\text{точка } 7)(\xi)}|_{98} = 0,225 \cdot 10^{-4}$. В обоих случаях вклад взаимодействия с 98 зернами 2-й координационной сферы составляет около 52 % от взаимодействия с 26 зернами 1-й координационной сферы. Это соответствует сделанному в работе [29] выводу о медленном убывании с расстоянием упругого взаимодействия в поликристаллах. Максимальные вклады от взаимодействия с 218 зернами 3-й координационной сферы и всех последующих также легко вычисляются, но для неупорядоченных нетекстурированных поликристаллов в этом нет практического смысла по следующим соображениям. Вычисленным экстремальным добавкам $\epsilon_{ij}^{(1)(\text{точка } 7)(\xi)}|_{26}$ и $\epsilon_{ij}^{(1)(\text{точка } 7)(\xi)}|_{98}$ соответствуют 26 и 98 троек вполне определенных углов Эйлера для зерен 1-й и 2-й координационных сфер. Если обозначить вероятность экстремальной ориентации осей отдельного зерна-соседа через P , то вероятность одновременной экстремальной ориентации осей зерен 1-й координационной сферы равна P^{26} , 1-й и 2-й координационных сфер – $P^{26}P^{98}$, 1-й, 2-й и 3-й координационных сфер – $P^{26}P^{98}P^{218}$ и т.д., то есть сильно уменьшается с ростом номера сферы, поскольку P во всяком случае меньше единицы. Поэтому ограничимся учетом взаимодействия с зернами 1-й и 2-й координационных сфер. Абсолютный максимум деформации в зерне наблюдается

для компоненты ϵ_{23} в точке 7 и равен $\epsilon_{23}^{(1)(\text{точка } 7)(\xi)} = (3,241 + 0,428 + 0,225) \cdot 10^{-4} = 3,894 \cdot 10^{-4}$. Это значение превосходит макродеформацию $\epsilon_{23}^* = 3 \cdot 10^{-4}$ на 29,8 %. Учитывая вышеизложенное, такой вывод относится к любой точке вблизи границы зерна. Таким образом, флуктуации деформаций в неупорядоченном поликристалле значительны и не могут полагаться малыми.

4. Оценка вероятностей реализации экстремальных конфигураций локальной микроструктуры

Произведем оценку вероятности реализации экстремальных значений деформаций в зерне. Эта вероятность определяется вероятностью реализации экстремальной конфигурации окружения выделенного зерна. Ограничимся анализом экстремальной конфигурации 26 ближайших зерен-соседей. Структура поликристалла принимается полностью неупорядоченной. В рассматриваемой модели это означает статистическую независимость ориентаций осей всех зерен. Однако вклады взаимодействия в неоднородность деформаций от разных соседей одной координационной сферы сильно различаются. В табл. 3 приведены вычисленные аддитивные вклады ближайших зерен-соседей в деформацию в точке 7 на рис. 3. Номера зерен-соседей нумеруются по рис. 2. Зерно № 1 – в зените, зерна № 2–8 – первый сверху пояс зерен, № 9–18 – зерна экваториального пояса, № 19–25 – нижний пояс и зерно № 26 – в надире.

Вклад зерна-соседа в зените ($33,4 \cdot 10^{-6}$) более чем в 30 раз превышает вклад зерна-соседа в надире и дает около четверти общего вклада в неоднородность. Суммарный вклад зерна в зените и шести (из семи) зерен верхнего пояса составляет более 60 % суммарного эффекта взаимодействия со всеми 26 соседями 1-й координационной сферы. Таким образом, семь ближайших

зерен дают основной вклад в появление экстремальных деформаций. Поэтому вероятность экстремальной конфигурации микроструктуры практически определяется вероятностью совместной экстремальной ориентации только этих зерен. Вычислительные эксперименты показали, что зависимость вклада в неоднородность от ориентации отдельного зерна-соседа вблизи максимума достаточно пологая. Вероятность попадания случайно ориентированного зерна в положение, дающее вклад 85 % и более от возможного абсолютного максимума для всех ближайших зерен-соседей колеблется около $P = 0,05$. Вероятность реализации экстремальной локальной микроструктуры из n зерен вокруг какого-либо определенного зерна имеет порядок P^n , то есть весьма мала. Эта локальная микроструктура представляет собой кластер небольшого количества согласованно ориентированных зерен. Макроскопический образец поликристаллического материала содержит очень много зерен, поэтому вероятность появления в нем таких кластеров может составлять конечную величину. Оценим порядок такой вероятности. В поликристаллическом образце каждое зерно имеет случайное окружение, поэтому макроскопический образец, содержащий N зерен, представляет собой статистическую выборку из N случайных локальных микроструктур. Легко видеть, что вероятность появления в такой выборке кластера экстремальной микроструктуры равна

$$\Pi = 1 - (1 - P^n)^N.$$

В макроскопическом образце размерами $10 \times 10 \times 10$ мм и средним диаметром зерна 20 мкм содержится $N = 1,25 \cdot 10^8$ зерен. Для $n = 7$ искомая вероятность $\Pi = 0,093$. Это заметная величина. Следовательно, при измерении некоторых механических свойств на партии из порядка 10 образцов весьма вероятно появление на единичных образцах больших отклонений от средних значений по партии, обусловленных не наличием каких-либо

Таблица 3

Вклады от взаимодействия с ближайшими соседями (*10⁶)

Table 3

Contributions from interactions with nearest neighbors (*10⁶)

Зенит									
№ = 1									
33,4329									
Верхний пояс, зерна № = 2–8									
2	3	4	5	6	7	8			
3,6359	9,1634	8,3775	8,7724	8,7264	8,3823	9,0074			
Экваториальный пояс, зерна № = 9–18									
9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
2,9284	4,3017	4,1246	4,1107	4,2894	2,9289	4,3077	4,1071	4,1031	4,3017
Нижний пояс, зерна № = 19–25									
19	20	21	22	23	24	25			
1,5001	2,2656	1,8092	2,0778	2,0695	1,7133	2,2509			
Надир									
N = 26									
1,0598									

дефектов или других аналогичных факторов, а стохастической природой упругих полей в поликристалле. Это может быть причиной большого разброса экспериментальных значений таких свойств чистых бездефектных поликристаллических материалов, измеряемых на образцах, как, например, пределы упругости и усталостной прочности. Подобные эксперименты проводятся при низких средних макронапряжениях, которые соответствуют низким средним напряжениям и деформациям в зерне. В отсутствие дефектов начало пластическому течению или появлению усталостной трещины дают экстремальные флуктуации локальных деформаций в отдельных зернах. Вероятность таких флуктуаций относительно невелика и может проявляться только в отдельных образцах.

Заключение

В работе, предложенный авторами ранее, метод решения краевых задач для поликристаллических материалов применен к исследованию неоднородностей деформаций в зернах поликристаллического материала. Показано, что источником неоднородности деформаций в каждом зерне являются внутриверенные и межзеренные взаимодействия деформаций, вклады которых аддитивны. Влияние внутриверенного взаимодействия фактически есть влияние формы рассматриваемого зерна на его деформированное состояние. В зернах сферической формы внутриверенное взаимодействие в сумме дает нулевой вклад, а неоднородность деформаций вызывается исключительно межзеренным взаимодействием. Разработанный общий алгоритм пригоден для расчета деформаций в зернах произвольной формы.

Основная цель настоящей работы заключалась в оценке роли межзеренного взаимодействия. Вычислительные эксперименты показали, что вклад межзеренного взаимодействия деформаций в зернах кубической формы отличается от вклада взаимодействия сферических зерен менее чем на 10 % (при равных объемах зерен и одинаковой анизотропии). Численная реализация метода для поликристаллов со средней анизотропией (типа гексагонального цинка) дает вызванную межзеренным взаимодействием концентрацию деформаций с максимальными значениями, превышающими средние деформации примерно на 30 %. Эта максимальная деформация обуславливается специфической конфигура-

цией кластера окружающих зерен, ближайших и более отдаленных. В макроскопических образцах неупорядоченных поликристаллов вероятность таких конфигураций конечна, поэтому маргинальные значения флуктуирующих деформаций могут иметь решающее значение для наступления критических событий в зернах, таких как зарождение трещин, зон пластического течения и других подобных эффектов.

Вклад взаимодействия зерен определяется введенными коэффициентами взаимодействия (18). В работе авторов [21] было показано, что в зависимости от типа анизотропии зерен величина коэффициентов взаимодействия изменяется более чем на порядок. Поэтому в поликристаллах с более низкой упругой симметрией зерен (каковыми являются, например, сложные многокомпонентные керамики) вклад взаимодействия в неоднородность деформаций может достигать 100 % и более от средних значений.

Прогнозирование возможных конфигураций экстремальных кластеров зерен может иметь практическое значение для относительно новой области материаловедения (годом рождения считается 1984-й [32]) – инженерии зерен (см. недавние обзоры [33, 34]), занимающейся поиском и формированием оптимальных микроструктур конструкционных материалов. Например, упрочнение металлов твердыми частицами-зернами (карбидами и т.п.) будет более эффективно, если окружающие зерна матричной фазы будут ориентированы так, что дают максимум напряжений в зернах упрочняющей фазы. Тогда по теореме о среднем напряжении основная нагрузка ляжет на упрочняющие зерна, что приведет к дополнительному упрочняющему эффекту. Предлагаемый нами метод позволяет прогнозировать такие оптимальные микроструктуры.

Благодарности

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты №15-01-06912, 16-01-00682, 17-41-590433 p_a).

Acknowledgments

The work has been carried out with the financial support of the Russian Foundation for Basic Research (Grants No. 15-01-06912, 16-01-00682, 17-41-590433 p_a).

Библиографический список

1. Antolovich S.D., Armstrong R.W. Plastic strain localization in metals: origins and consequences // *Progress in Materials Science*. – 2014. – Vol. 59. – P. 1–160. DOI: org/10.1016/j.pmatsci.2013.06.001
2. Pineau A., Benzerga A.A., Pardoën T. Failure of metals I: Brittle and ductile fracture // *Acta Materialia*. – 2016. – Vol. 107. – P. 424–483. DOI: org/10.1016/j.actamat.2015.12.034
3. Failure of metals II: Fatigue / A. Pineau, D.L. McDowell, E.P. Busso, S.D. Antolovich // *Acta Materialia*. – 2016. – Vol. 107. – P. 484–507. DOI: org/10.1016/j.actamat.2015.05.050
4. Pineau A., Benzerga A.A., Pardoën T. Failure of metals III. Fracture and fatigue of nanostructured metallic materials //

Acta Materialia. – 2016. – Vol. 107. – P. 508–544. DOI: org/10.1016/j.actamat.2015.07.049

5. Voight W. *Lehrbuch der Kristallphysik*. – Leipzig und Berlin: Teubner, 1928. – 978 p.

6. Reuss A., Berechnung der Fließgrenze von Mischkristallen auf Grund der plastizitätsänderung für einkristalle // *Z. Angew. Math. und Mech.* – 1929. – Vol. 9. – No. 1. – P. 49–56.

7. Шермергор Т.Д. Теория упругости микронеоднородных сред. – М.: Наука, 1977. – 400 с.

8. Штремель М.А. Прочность сплавов. Ч. II. Деформация. – М: Изд-во МИСИС, 1997.–527 с.

9. Multiscale Modeling and Simulation of Composite Materials and Structures. Eds Y.W. Kwon, D.H. Allen, R. Talreja – Springer Science+Business Media, LLC, 2008. – 630 p.

10. Overview of constitutive laws, kinematics, homogenization and multiscale methods in crystal plasticity finite-element modeling: Theory, experiments, applications / F. Roters, P. Eisenlohr, L. Hantcherli, D.D. Tjahjanto, T.R. Bieler, D. Raabe // *Acta Materialia*. – 2010. – Vol. 58. – P. 1152–1211. DOI: 10.1016/j.actamat.2009.10.058

11. Geers M.G.D., Kouznetsova V.G., Brekelmans W.A.M. Multi-scale computational homogenization: Trends and challenges // *Journal of Computational and Applied Mathematics*. – 2010. – Vol. 234. – P. 2175–2182. DOI: 10.1016/j.cam.2009.08.077

12. Multiscale modelling of plasticity and fracture by means of dislocation mechanics. Eds Pippan R., Gumbsch P. – Springer Wien New York, 2010. – 394 p.

13. Трусов П.В., Швейкин А.И. Многоуровневые физические модели моно- и поликристаллов. Статистические модели // *Физическая мезомеханика*. – 2011. – Т. 14, № 4. – С. 17–28.

14. Трусов П.В., Швейкин А.И. Многоуровневые физические модели моно- и поликристаллов. Прямые модели // *Физическая мезомеханика*. – 2011. – Т. 14, № 5. – С. 5–30.

15. Raabe D. Computational materials science. – WILEY-VCH Verlag GmbH, 1998. – 382 p.

16. Computational Methods for Microstructure-Property Relationships. Eds Ghosh S., Dimiduk D. – Springer Science+ Business Media, LLC, 2011. – 658 p. DOI: 10.1007/978-1-4419-0643-4

17. Hill R. Elastic properties of reinforced solids – some theoretical principles // *Journal of Mechanics and Physics of Solids*. – 1963. – Vol. 11. – No. 5. – P. 357–372.

18. Moussaddy H., Theriault D., Levesque M. Assessment of existing and introduction of a new and robust efficient definition of the representative volume element // *International Journal of Solids and Structures*. – 2013. – Vol. 16. – P. 3817–3828. DOI: org/10.1016/j.ijsostr.2013.07.016

19. Determination of the size of the representative volume element for random quasi-brittle composites / Pelissou, Baccou, Monerie, F. Perales // *International Journal of Solids and Structures*. – 2009. – Vol. 46. – P. 2842–2855. DOI: 10.1016/j.ijsostr.2009.03.015

20. Shavshukov V., Tashkinov A. Quantum Field Theory Approach to Mechanics of Polycrystals // *Solid State Phenomena*. – 2016. – Vol. 243. – P. 131–138. DOI: 10.4028/www.scientific.net/SSP.243.131

References

1. Antolovich S.D., Armstrong R.W.. Plastic strain localization in metals: origins and consequences, *Progress in Materials Science*, 2014, vol. 59, pp. 1-160. DOI: 10.1016/j.pmatsci.2013.06.001

2. Pineau A., Benzerga A.A., Pardoën T.. Failure of metals I: Brittle and ductile fracture, *Acta Materialia*, 2016, vol. 107, pp. 424-483. DOI: 10.1016/j.actamat.2015.12.034.

3. Pineau A., McDowell D.L., Busso E.P., Antolovich S.D. Failure of metals II: Fatigue, *Acta Materialia*, 2016, vol. 107, pp. 484-507. DOI: 10.1016/j.actamat.2015.05.050.

4. Pineau A., Benzerga A.A., Pardoën T.. Failure of metals III. Fracture and fatigue of nanostructured metallic materials, *Acta Materialia*, 2016, vol. 107, pp. 508-544. DOI: 10.1016/j.actamat.2015.07.049.

5. Voight W. *Lehrbuch der Kristallphysik*. Leipzig und Berlin, Teubner, 1928, 978 p.

6. Reuss A., Berechnung der Fließgrenze von Mischkristallen auf Grund der plastizitätsbedingung für einkristalle. *Z. Angew. Math. und Mech.*, 1929, vol. 9, no. 1, pp. 49-56.

7. Shermegor T.D. Теорія пружності мікронеоднородних серед [Theory of elasticity of micro inhomogeneous media]. Moscow, Nauka, 1977, 400 p.

21. Ташкинов А.А., Шавшуков В.Е. Решение задач механики деформирования поликристаллических материалов на основе теории возмущений // *Вычислительная механика сплошных сред*. – 2016. – Т. 9, № 4. – С. 486–497. DOI: 10.7242/1999-6691/2016.9.4.41

22. Лифшиц И.М., Розенцвейг Л.Н. К теории упругих свойств поликристаллов // *Журн. эксперимент. теор. физ.* – 1946. – Т. 16, № 11. – С. 967–980.

23. Eshelby J.D. The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion and related problems // *Proc. R. Soc. A* 241. – 1957. – P. 376–396. DOI: 10.1098/rspa.1957.0133

24. Кривоглаз М.А., Черевко А.С. Об упругих модулях твердой смеси // *Физика металлов и металловедение*. – 1959. – Т. 8, № 2. – С. 164–164.

25. Christensen R. *Mechanics of Composite Materials*. – New York: John Wiley & Sons, 1979. – 336 p.

26. Кунин И.А., Соснина Э.Г. Эллипсоидальная неоднородность в упругой среде // *Докл. Акад. наук СССР*. – 1971. – Т. 9, № 3. – С. 571–574.

27. Mura T. *Micromechanics of Defects in Solids*. – Dordrecht. – Martinus Nijhoff Publishers, 1987. – 587 p.

28. Шавшуков В.Е. Распределение полей напряжений в поликристаллических материалах // *Физическая мезомеханика*. – 2012. – Т. 15, № 6. – С. 85–91.

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

30. Богачев И.Н., Вайнштейн А.А., Волков С.Д. *Статистическое металловедение*. – М.: Металлургия, 1984. – 176 с.

31. Францевич И.Н., Воронов Ф.Ф., Бакута С.А. *Упругие постоянные и модули упругости металлов и неметаллов*. – Киев: Наукова думка, 1982. – 286 с

32. Tadao Watanabe. An approach to grain boundary design for strong and ductile polycrystals // *Res Mechanica*. – 1984. – Vol. 11. – No. 1. – P. 47–84.

33. Randle V. Grain boundary engineering: an overview after 25 years // *Materials Science and Technology*. – 2010. – Vol. 26. – No. 3. – P. 253–261.

34. Watanabe T. Grain boundary engineering: historical perspective and future prospects // *Journal of Materials Science*. – 2011. – Vol. 46. – P. 4095–4115. DOI: 10.1007/s10853-011-5393-z

8. Shtremel M.A. Prochnost splavov. Chast II. Deformatsia [Strength of alloys. Part II. Deformation]. Moscow, *MISIS*, 1997, 527 p.

9. Kwon Y.W., Allen D.H., Talreja R. Multiscale Modeling and Simulation of Composite Materials and Structures. *Springer Science+Business Media*, LLC, 2008, 630 p.

10. Roters F., Eisenlohr P., Hantcherli L., Tjahjanto D.D., Bieler T.R., Raabe D. Overview of constitutive laws, kinematics, homogenization and multiscale methods in crystal plasticity finite-element modeling: Theory, experiments, applications, *Acta Materialia*, 2010, vol. 58, pp. 1152-1211. DOI: 10.1016/j.actamat.2009.10.058.

11. Geers M.G.D., Kouznetsova V.G., Brekelmans W.A.M. Multi-scale computational homogenization: Trends and challenges, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 2010, vol. 234, pp. 2175-2182. DOI: 10.1016/j.cam.2009.08.077.

12. Pippan R., Gumbsch P. Multiscale modelling of plasticity and fracture by means of dislocation mechanics. SpringerWienNewYork, 2010, 394 p.

13. Trusov P.V., Shveikin A.I. Mnogoyrovnevye phisicheskie modeli mono- i polikristallov. Statisticheskie modeli. [Multilevel physical modeling of single- and polycrystals. Statistical models].

Physicheskaya mesomechanika – Physical mesomechanics, 2011, vol. 14, no. 4, pp. 17-28.

14. Trusov P.V., Shveikin A.I. Mnogoyrovnevye phisicheskie modeli mono- i polikristallov. Pryamyie modeli. [Multilevel physical modeling of single- and polycrystals. Direct models]. *Physicheskaya mesomechanika – Physical mesomechanics*, 2011, vol.14, no. 5, pp. 5-30.

15. Raabe D.. Computational materials science. WILEY-VCH Verlag GmbH. 1998. 382 p.

16. . Ghosh S., Dimiduk D. Computational methods for microstructure-property relationshipseds. *Springer Science+Business Media*, LLC, 2011, 658 p. DOI: 10.1007/978-1-4419-0643-4.

17. Hill R. Elastic properties of reinforced solids – some theoretical principles. *Journal of Mechanics and Physics of Solids*, 1963, vol. 11, no. 5, pp. 357-372.

18. Moussaddy H., Therriault D., Levesque M.. Assessment of existing and introduction of a new and robust efficient definition of the representative volume element. *International Journal of Solids and Structures*, 2013, vol. 16. pp.3817-3828. DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2013.07.016.

19. Pelissou C., Baccou J., Monerie Y., Perales F.. Determination of the size of the representative volume element for random quasi-brittle composites. *International Journal of Solids and Structures*, 2009, vol. 46, pp 2842-2855. DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2009.03.015

20. Shavshukov V. and Tashkinov A.. Quantum Field Theory Approach to Mechanics of Polycrystals. *Solid State Phenomena*, 2016, vol. 243, pp 131-138. DOI: 10.4028/www.scientific.net/SSP.243.131

21. Tashkinov A.A., Shavshukov V.E. Reshenie zadach mekhaniki deformirovaniya polikristallicheskih materialov na osnove teorii vozmushchenii [Solving the problems of deformation mechanics of polycrystalline materials on the basis of perturbation theory]. *Vychislitelnaia mekhanika sploshnykh sred – Computational continuum mechanics*, 2016, vol.16, no. 4, pp. 486-497. DOI: 10.7242/1999-6691/2016.9.4.41

22. Lifshitz I.M., Rosenzweig L.N. K teorii uprugikh svoystv polikristallov [On the theory of elastic properties of polycrystals]. *Jurnal eksper. i teoreticheskoi fiziki – Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 1946, vol.16, no. 11, pp.967-980.

23. Eshelby, J. D. The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion and related problems. *Proc. R. Soc. A* 241, 1957, pp. 376-396. DOI: 10.1098/rspa.1957.0133.

24. Krivoglaz M.A., Cherevko A.S. Ob uprugikh modulyakh tverdoi smesi [On elastic moduli of solid mixtures]. *Fizika metallov I metallovedenie – Physics of metals and metallography*, 1959, vol. 8, no.2, pp. 164-164.

25. Christensen R. Mechanics of Composite Materials. *New York: John Wiley & Sons*, 1979, 336 p.

26. Kunin I.A., Sosnina E.G. Ellipsoidalnaia neodnorodnost v uprugoi srede [Ellipsoidal inhomogeneity in elastic medium]. *Doklady Akademii nauk SSSR –Proceedings of USSR academy of sciences*, 1971, vol. 9, no. 3, pp. 571-574.

27. T.Mura. Micromechanics of Defects in Solids. *Dordrecht: Martinus Nijhoff Publishers*, 1987, 587 p.

28. Shavshukov V.E. Raspredeleniye polei napryazhenii v polikristallicheskih materialakh [Distribution of stress fields in polycrystalline materials]. *Fizicheskaya mezomekhanika – Physical Mesomechanics*, 2012, vol. 15, No.6, pp.85-91.

29. 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.

30. Bogachev I.N., Vainshtein A.A., Volkov S.D. Statisticheskoye metallovedeniye [Statistical metallography]. Moscow, *Metallurgiya*, 1984, 176 p.

31. Franchevich I.N., Voronov F.F., Bakuta S.A. Uprugie postoyannye I moduli uprugosti metallov I nemetallov [Elastic constants and moduli of merals and nonmetals]. Kiev, *Naukova dumka*, 1982, 286 p.

32. Tadao Watanabe. An approach to grain boundary design for strong and ductile polycrystals. *Res Mechanica*, 1984, vol.11, no.1, pp. 47-84.

33. V.Randle. Grain boundary engineering: an overview after 25 years. *Materials Science and Technology*, 2010, vol.26, no.3, pp 253-261.

34. Tadao Watanabe. Grain boundary engineering: historical perspective and future prospects. *Journal of Materials Science*, 2011, vol. 46, pp. 4095-4115. DOI: 10.1007/s10853-011-5393-z