



Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Московский государственный технический университет  
имени Н. Э. Баумана  
(национальный исследовательский университет)»  
(МГТУ им. Н. Э. Баумана)

---

ФАКУЛЬТЕТ \_\_\_\_\_ Фундаментальные науки  
КАФЕДРА \_\_\_\_\_ Прикладная математика

Домашнее задание  
по курсу  
"Математические модели прикладной механики"  
на тему:

*Упругие характеристики  
поликристаллических металлов*

*Вариант 15*

*$\alpha\text{-Fe} + \text{Cd}$*

Студент \_\_\_\_\_  
ФН2-72Б  
(Группа)

\_\_\_\_\_  
(Подпись, дата)

А. И. Токарев  
\_\_\_\_\_  
(И. О. Фамилия)

Преподаватель

\_\_\_\_\_  
(Подпись, дата)

И. Ю. Савельева  
\_\_\_\_\_  
(И. О. Фамилия)

2022 г.

## Содержание

Постановка задачи . . . . .	3
Список условных обозначений . . . . .	4
1. Матрицы податливости и упругости для различных типов решеток .	5
1.1. Кубическая решетка . . . . .	5
1.2. Гексагональная решетка . . . . .	6
2. Зависимость линейной податливости от направления единичного вектора . . . . .	7
2.1. Линейная податливость для Cd (ГПУ) . . . . .	7
2.2. Линейная податливость для $\alpha$ -Fe (Кубическая кристаллическая решетка) . . . . .	8
2.2.1. Единичный вектор в плоскости грани . . . . .	8
2.3. Вектор находится в плоскости, содержащей диагонали двух граней, имеющие общую точку . . . . .	9
2.4. Единичный вектор лежит в плоскости, содержащей диагонали грани и куба, имеющие общую точку . . . . .	11
2.5. Единичный вектор лежит в плоскости, содержащей диагональ куба и ребро, имеющие общую точку . . . . .	12
3. Экстремальные значения линейной податливости . . . . .	14
4. Отношение полуосей эллипсоида вращения, образующегося путем всестороннего сжатия шара из металла с ГПУ решеткой . . . . .	14
5. Верхняя и нижняя оценки параметров $\kappa$ , $\mu$ , $E$ , $\nu$ . . . . .	15
5.1. Кубическая кристаллическая решетка . . . . .	16
5.2. ГПУ . . . . .	16
6. Задача Эшелби . . . . .	17
7. Задача с пористым двухфазным сплавом-смесью . . . . .	18
8. Заключение . . . . .	22
Список литературы . . . . .	23

## Постановка задачи

Для заданной пары чистых металлов ( $\alpha\text{-Fe}$  – железо,  $\text{Cd}$  – кадмий) по значению коэффициентов упругости (или податливости) кристаллов вычислить элементы матрицы коэффициентов податливости (или упругости), сравнить точность обращения матриц с вычислением по формулам, и построить графики зависимостей линейной податливости от направления единичного вектора для гексагональной кристаллической решетки в плоскости, содержащей оптическую ось кристалла, а для кубической кристаллической решетки в плоскости грани и в плоскостях, имеющих общую точку диагонали двух граней, диагонали грани и куба, диагональ куба и ребро. Для кристаллической решетки каждого из металлов определить направления, по которым линейная податливость имеет экстремальные значения.. Найти отношение полуосей эллипсоида вращения, образующегося после действия всестороннего давления на шар из металла с ГПУ кристаллической решеткой.

Для каждого из металлов в предположении хаотической ориентации зерен в поликристалле найти верхнюю и нижнюю оценки модулей сдвига, продольной и объемной упругости, оценки коэффициента Пуассона и сравнить полученные значения с вычисленными для случая статистически усредненной шаровой формы кристаллических зерен. Провести аналогичные расчеты и построить графики для пористого двухфазного сплава-смеси заданной пары металлов при трех фиксированных значениях объемной пористости, равных 0; 0.1 и 0.2, в зависимости от отношения  $\frac{V_1}{(V_1 + V_2)} \in [0; 1]$ , где  $V_1$  и  $V_2$  – объемные доли металлов в сплаве.

Таблица 1. Коэффициенты упругости и податливости

$\alpha\text{-Fe}$	$C_{11}$	$C_{12}$	$C_{14}$	$\text{Cd}$	$S_{11}$	$S_{12}$	$S_{13}$	$S_{33}$	$S_{44}$
ГПа	234	135	114	ГПа <sup>-1</sup>	12.4	-0.76	-9.97	37.5	63.7

## Список условных обозначений

$C$	— матрица коэффициентов упругости
$C_{ij}$	— элементы матрицы $C$ ( $i, j = \overline{1, 6}$ )
$S$	— матрица коэффициентов податливости
$S_{ij}$	— элементы матрицы $S$ ( $i, j = \overline{1, 6}$ )
$\vec{n} = \{n_1, n_2, n_3\}$	— единичный вектор нормали, заданный в кристаллографических осях. Компоненты $n_i$ — проекции на $Ox'_i$
$S_n$	— линейная податливость в направлении $\vec{n}$
$e^{(\vec{n})}$	— относительное удлинение в направлении $\vec{n}$
$\sigma_{kl}$	— компоненты тензора напряжений $\hat{\sigma}$ ( $k, l = \overline{1, 3}$ )
$S_{ijkl}$	— компоненты тензора податливости $\hat{S}$ ( $i, j, k, l = \overline{1, 3}$ )
$\epsilon_{kl}$	— компоненты тензора малой деформации $\hat{\epsilon}$ ( $k, l = \overline{1, 3}$ )
$p$	— давление
$\delta_{ij}$	— символ Кронекера
$V_0$	— контрольный объем
$I_{ijkl}$	— единичный тензор 4-го ранга ( $i, j, k, l = \overline{1, 3}$ )
$\nu$	— коэффициент Пуассона
$C_{ijkl}$	— компоненты тензора коэффициентов упругости $\hat{C}$ ( $i, j, k, l = \overline{1, 3}$ )
$C_{ijkl}^o$	— эффективные упругие характеристики поликристалла ( $i, j, k, l = \overline{1, 3}$ )
$S_{ijkl}^o$	— эффективные характеристики податливости поликристалла ( $i, j, k, l = \overline{1, 3}$ )
$\omega_{ijkl}$	— тензор Эшелби ( $i, j, k, l = \overline{1, 3}$ )
$E$	— модуль Юнга, ГПа
$\mu$	— модуль сдвига, ГПа
$\kappa$	— модуль объемной упругости, ГПа

# 1. Матрицы податливости и упругости для различных типов решеток

## 1.1. Кубическая решетка

В кристаллах с кубической решеткой матрицы коэффициентов податливости  $S$  и упругости  $C$  содержат лишь по 3 независимых и отличных от нуля коэффициента:

$$C = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{pmatrix},$$

$$S = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{11} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{12} & S_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & S_{44} \end{pmatrix}.$$

Обращение дает следующие расчетные формулы для ненулевых элементов матрицы  $S$ :

$$S_{11} = \frac{C_{11} + C_{12}}{C_K}, \quad S_{12} = -\frac{C_{12}}{C_K}, \quad S_{44} = \frac{1}{C_{44}}, \quad C_K = (C_{11} - C_{12})(C_{11} + 2C_{12}).$$

Пользуясь системой компьютерной алгебры Wolfram Mathematica, получим эти значения:

$$S_{11} = 7.4, \quad S_{12} = -2.7, \quad S_{13} = 8.8, \quad S_{ij} = [\text{ТПа}^{-1}].$$

Если вычислять эти коэффициенты путем обращения матрицы  $C$ , то можно оценить точность заданных формул:

$$\|S - C^{-1}\| = 2 \cdot 10^{-27}.$$

### 1.2. Гексагональная решетка

В кристаллах с гексагональной решеткой в матрицах  $S$  и  $C$  уже присутствуют по 5 независимых компонент:

$$S = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} & 0 & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{11} & S_{13} & 0 & 0 & 0 \\ S_{13} & S_{13} & S_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & S_{66} \end{pmatrix},$$

$$C = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{13} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{66} \end{pmatrix},$$

где  $S_{66} = 2(S_{11} - S_{12})$  и  $C_{66} = \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12})$ .

Обращение  $S$  дает следующие расчетные формулы для ненулевых элементов матрицы  $C$ :

$$C_{11} = \frac{S_{33}}{2S_r} + \frac{1/2}{S_{11} - S_{12}}, \quad C_{12} = \frac{S_{33}}{2S_r} - \frac{1/2}{S_{11} - S_{12}}, \quad C_{13} = -\frac{S_{13}}{S_r}, \quad C_{33} = \frac{S_{11} + S_{12}}{S_r},$$

$$C_{44} = \frac{1}{S_{44}}, \quad C_{66} = \frac{1}{S_{66}}, \quad S_r = (S_{11} + S_{12})S_{33} - 2S_{13}^2.$$

Вычисляя эти значения, получим:

$$C_{11} = 116.9, \quad C_{12} = 40.9, \quad C_{13} = 42, \quad C_{33} = 49, \quad C_{44} = 15.7, \quad C_{66} = 38, \\ C = [\text{ГПа}].$$

А норма ошибки составляет:

$$\|C - S^{-1}\| = 1.5 \cdot 10^{-5}.$$

## 2. Зависимость линейной податливости от направления единичного вектора

Податливость кристаллов с кубическими решетками в направлении действия растягивающей или сжимающей силы равна:

$$S_n = S_{11} - S_{44}(S^* - 1)(n_1^2 n_2^2 + n_2^2 n_3^2 + n_3^2 n_1^2), \quad (1)$$

$$S^* = 2 \frac{S_{11} - S_{12}}{S_{44}}.$$

Из формулы 1 видно, что при  $S^* = 1$  податливость не зависит от направления силы.

Податливость кристаллов с ГПУ-решетками зависит от угла между оптической кристаллографической осью  $Ox'_3$  и направлением силы:

$$S_n = S_{11}(1 - n_3^2) + S_{33}n_3^4 + (2S_{13} + S_{44})n_3^2(1 - n_3^2), \quad (2)$$

где  $\vec{n} = (n_1, n_2, n_3)^T$  – единичный вектор, определяющий направление силы.

### 2.1. Линейная податливость для Cd (ГПУ)

Рассмотрим случай, когда  $\vec{n}$  лежит в плоскости, содержащей оптическую ось кристалла. Из этого следует, что  $n_3 = \cos \gamma$ , где  $\gamma = \widehat{(\vec{n}, Ox'_3)}$ ,  $\gamma \in \left[0, \frac{\pi}{2}\right]$ .

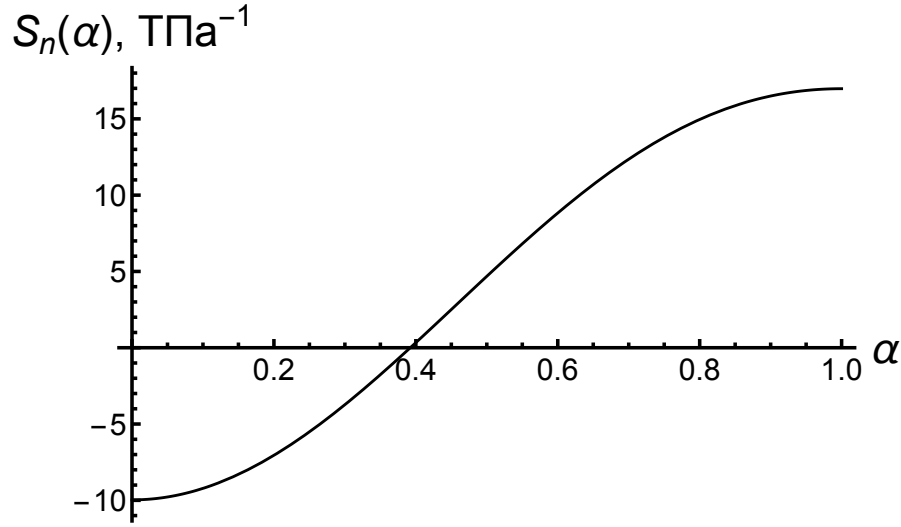


Рис. 1. График линейной податливости в плоскости, содержащей оптическую ось кристалла

## 2.2. Линейная податливость для $\alpha$ -Fe (Кубическая кристаллическая решетка)

### 2.2.1. Единичный вектор в плоскости грани

Есть три плоскости, содержащие начало координат кристаллографической системы:

1.  $\vec{n} \in \pi_1 : n_3 = 0, n_1 = \cos \alpha, n_2 = \sin \alpha, \alpha \in \left[0; \frac{\pi}{2}\right]$ .
2.  $\vec{n} \in \pi_2 : n_2 = 0, n_1 = \cos \beta, n_3 = \sin \beta, \beta \in \left[0; \frac{\pi}{2}\right]$ .
3.  $\vec{n} \in \pi_3 : n_1 = 0, n_2 = \cos \gamma, n_3 = \sin \gamma, \gamma \in \left[0; \frac{\pi}{2}\right]$ .

Достаточно рассмотреть один из трех случаев. Выберем  $\vec{n} \in \pi_1$ . Подставив эти значения в (1), получим:

$$S_n(\alpha) = S_n(\cos \alpha, \sin \alpha, 0) = S_{11} - (2(S_{11} - S_{12}) - S_{44}) \cos^2 \alpha \sin^2 \alpha.$$



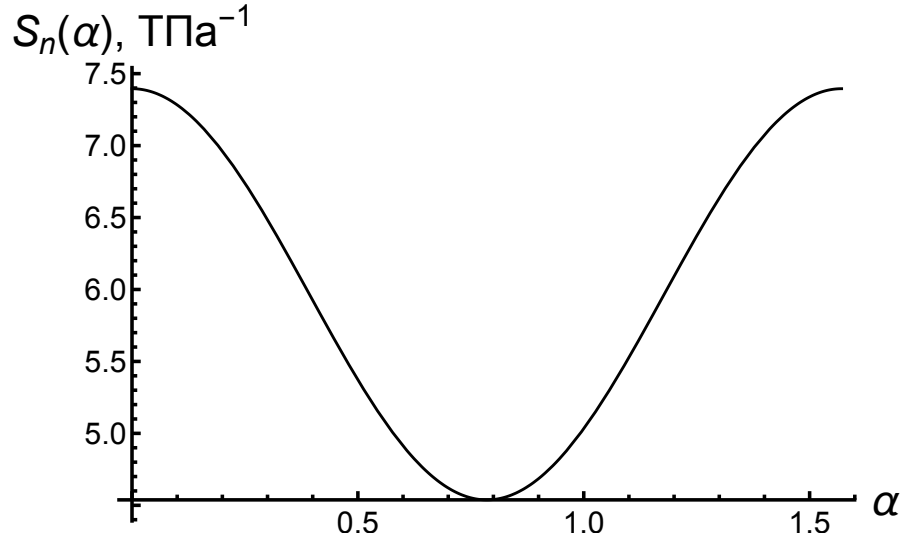


Рис. 2. График линейной податливости в плоскости грани куба

### 2.3. Вектор находится в плоскости, содержащей диагонали двух граней, имеющие общую точку

Пусть первая диагональ лежит в плоскости  $\pi_2$ , вторая — в  $\pi_3$ , а общая точка — начало координат. Векторы  $\vec{b}_1 = \vec{i} + \vec{k}$ ,  $\vec{b}_2 = \vec{j} + \vec{k}$ , лежат на этих диагоналях, следовательно, в рассматриваемой плоскости. Но не ортогональны, потому что  $\cos \widehat{\vec{b}_1, \vec{b}_2} = \frac{1}{2}$ . Ортогонализируем по алгоритму Грама-Шмидта:

$$\vec{e}_1 = \frac{\vec{b}_1}{\|\vec{b}_1\|} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{i} + \vec{k}),$$

$$\vec{d}_2 = \vec{b}_2 - \langle \vec{e}_1, \vec{b}_2 \rangle \vec{e}_1 = -\frac{1}{2}\vec{i} + \vec{j} + \frac{1}{2}\vec{k},$$

$$\vec{e}_2 = \frac{\vec{d}_2}{\|\vec{d}_2\|} = -\frac{1}{\sqrt{6}}\vec{i} + \frac{1}{\sqrt{3}}\vec{j} + \frac{1}{\sqrt{6}}\vec{k}.$$

Тогда вектор  $\vec{e}_3$  определим:

$$\vec{e}_3 = \vec{e}_1 \times \vec{e}_2 = -\frac{1}{\sqrt{3}}\vec{i} - \frac{1}{\sqrt{3}}\vec{j} + \frac{1}{\sqrt{3}}\vec{k}.$$

$$A_{\mathcal{B} \rightarrow \mathcal{E}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{3}} \\ 0 & \sqrt{\frac{2}{3}} & -\frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}$$

Тогда получим

$$\begin{pmatrix} n_1 \\ n_2 \\ n_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \cos \alpha - \frac{1}{\sqrt{6}} \sin \alpha \\ \sqrt{\frac{2}{3}} \sin \alpha \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \cos \alpha + \frac{1}{\sqrt{6}} \sin \alpha \end{pmatrix} \quad (3)$$

В случае, если  $\alpha \in \left[0; \frac{\pi}{3}\right]$  вектор  $\vec{n}$  расположен внутри куба и плоскости  $-x_1 - x_2 + x_3 = 0$ . Получим зависимость:

$$S_n(\alpha) = S_n\left(\frac{1}{\sqrt{2}} \cos \alpha - \frac{1}{\sqrt{6}} \sin \alpha, \sqrt{\frac{2}{3}} \sin \alpha, \frac{1}{\sqrt{2}} \cos \alpha + \frac{1}{\sqrt{6}} \sin \alpha\right).$$

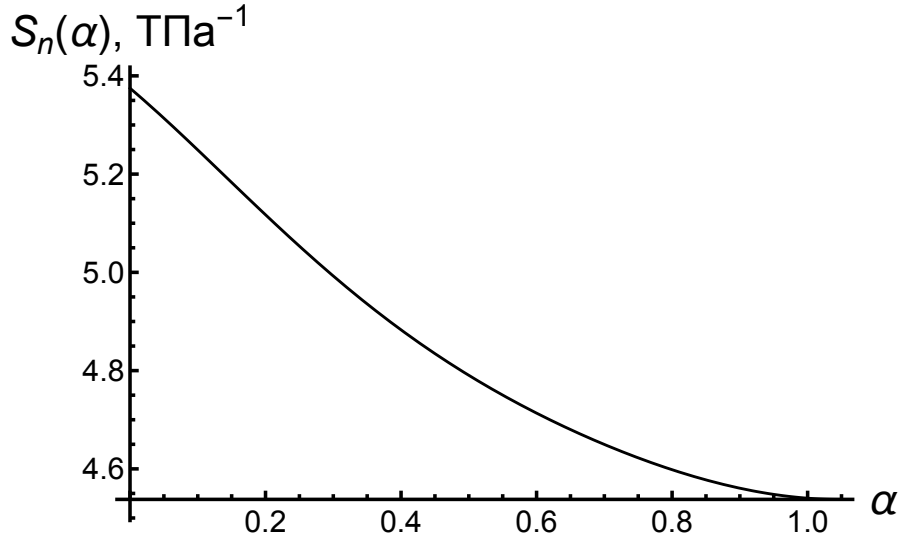


Рис. 3. График  $S_n(\alpha)$ ,  $0 \leq \alpha \leq \frac{\pi}{3}$

Получаем, что графиком функции является прямая, параллельная оси абсцисс. Полученный результат закономерен, так как  $n_1^2 n_2^2 + n_2^2 n_3^2 + n_3^2 n_1^2 = \frac{1}{4}$ .

#### 2.4. Единичный вектор лежит в плоскости, содержащей диагонали грани и куба, имеющие общую точку

Пусть диагональ грани лежит в плоскости  $\pi_3$ , диагональ куба проходит через начало координат. Векторы  $\vec{b}_1 = \vec{i} + \vec{k}$ ,  $\vec{b}_2 = \vec{i} + \vec{j} + \vec{k}$  лежат на этих диагоналях, а следовательно и в рассматриваемой плоскости. Но они не ортогональны, так как  $\cos(\widehat{\vec{b}_1, \vec{b}_2}) = \sqrt{\frac{2}{3}}$ . Применим к ним процесс ортогонализации Грама-Шмидта.

$$\begin{aligned}\vec{e}_1 &= \frac{\vec{b}_1}{\|\vec{b}_1\|} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{i} + \vec{k}), \\ \vec{d}_2 &= \vec{b}_2 - \langle \vec{e}_1, \vec{b}_2 \rangle \vec{e}_1 = \vec{j}, \\ \vec{e}_2 &= \vec{j}.\end{aligned}$$

Оставшийся вектор  $\vec{e}_3$  определим из соотношения

$$\vec{e}_3 = \vec{e}_1 \times \vec{e}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(-\vec{i} + \vec{k})$$

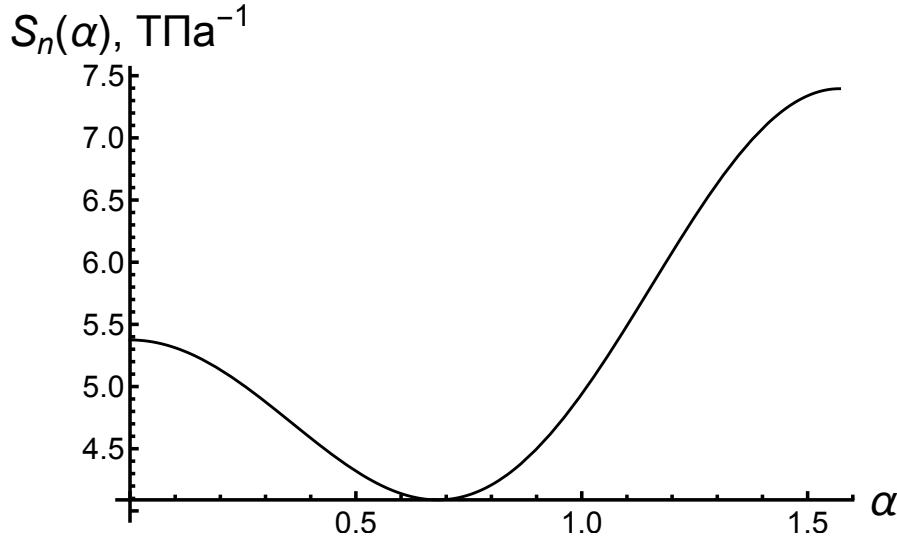
Выберем  $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3$  в качестве базиса  $e$ . Тогда

$$\mathcal{A}_{\mathcal{B} \rightarrow \mathcal{E}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & 1 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} n1 \\ n2 \\ n3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \cos \alpha \\ \sin \alpha \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \cos \alpha \end{pmatrix}.$$

При  $\alpha \in \left[0, \frac{\pi}{2}\right]$  вектор  $\vec{n}$  расположен внутри куба в плоскости  $-x_1 + x_3 = 0$ . Получим зависимость

$$S_n(\alpha) = S_n\left(\frac{1}{\sqrt{2}} \cos \alpha, \sin \alpha, \frac{1}{\sqrt{2}} \cos \alpha\right).$$

Рис. 4. График  $S_n(\alpha)$ ,  $0 \leq \alpha \leq \frac{\pi}{2}$ 

### 2.5. Единичный вектор лежит в плоскости, содержащей диагональ куба и ребро, имеющие общую точку

Пусть диагональ куба проходит через начало координат, ребро лежит на оси  $x_1$ . Векторы  $\vec{e}_1 = \vec{i}$ ,  $\vec{b}_2 = \vec{i} + \vec{j} + \vec{k}$  лежат на ребре и диагонали соответственно, а следовательно, и в рассматриваемой плоскости. Но они не ортогональны, так как  $\cos(\widehat{\vec{e}_1, \vec{b}_2}) = \frac{1}{\sqrt{3}}$ . Применим к ним процесс ортогонализации Грама-Шмидта:

$$\begin{aligned}\vec{d}_2 &= \vec{b}_2 - \langle \vec{e}_1, \vec{b}_2 \rangle \vec{e}_1 = \vec{j} + \vec{k}, \\ \vec{e}_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{j} + \vec{k}).\end{aligned}$$

Оставшийся вектор  $\vec{e}_3$  определим из соотношения

$$\vec{e}_3 = \vec{e}_1 \times \vec{e}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{j} + \vec{k}).$$

Выберем  $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3$  в качестве базиса  $\mathcal{E}$ . Тогда

$$\mathcal{A}_{B \rightarrow \mathcal{E}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} n1 \\ n2 \\ n3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \alpha \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \alpha \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \alpha \end{pmatrix}.$$

При  $\alpha \in \left[0, \frac{\pi}{2}\right]$  вектор  $\vec{n}$  расположен внутри куба в плоскости  $-x_2 + x_3 = 0$ .  
Получим зависимость

$$S_n(\alpha) = S_n\left(\cos \alpha, \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \alpha, \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \alpha\right).$$

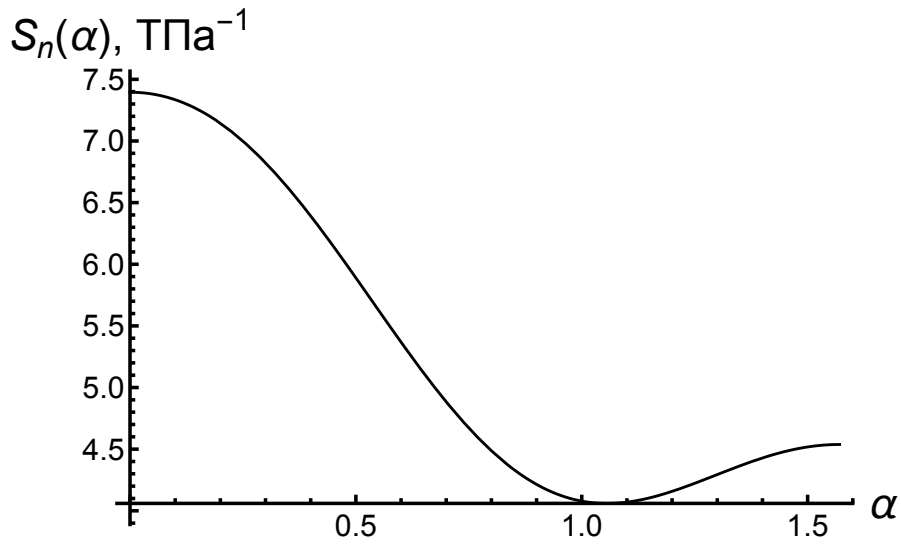


Рис. 5. График  $S_n(\alpha)$ ,  $0 \leq \alpha \leq \frac{\pi}{2}$

Рассмотренная в предыдущем разделе плоскость удовлетворяет условиям этого пункта, то есть рис. 4 подходит и для рассматриваемого в данном пункте случая. Заметим, что если повернуть плоскость рис. 5 на угол  $\pi$  по оси, совпадающей с осью  $OS_n$ , то с помощью преобразования параллельного переноса можно совместить кривые на рис. 5.

### 3. Экстремальные значения линейной податливости

Для нахождения направления, вдоль которых линейная податливость максимальная (минимальная) нужно максимизировать (минимизировать) системы:

$$\begin{aligned} \text{Fe: } & \begin{cases} S_{11} - (2(S_{11} - S_{12}) - S_{44})[n_1^2 n_2^2 + n_1^2 n_3^2 + n_2^2 n_3^2] \rightarrow \max(\min), \\ n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = 1, \end{cases} \\ \text{Cd: } & \begin{cases} S_{11}(1 - n_3^2) + S_{33}n_3^2 + 2(S_{13} + S_{44})(1 - n_3^2)n_3^2 \rightarrow \max(\min), \\ n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = 1. \end{cases} \end{aligned}$$

Для железа получаем:

$$\begin{aligned} S_{\max} &= 7.4, \quad \vec{n} = \{1, -1.1 \cdot 10^{-22}, -5 \cdot 10^{-21}\}^T, \\ S_{\min} &= 3.6, \quad \vec{n} = \{0.57, 0.57, 0.57\}^T. \end{aligned}$$

Для кадмия получаем:

$$\begin{aligned} S_{\max} &= 39.5, \quad \vec{n} = \{0, 0, 0.89\}^T, \\ S_{\min} &= 12.4, \quad \vec{n} = \{0, 0, 7.8 \cdot 10^{-9}\}^T. \end{aligned}$$

### 4. Отношение полуосей эллипсоида вращения, образующегося путем всестороннего сжатия шара из металла с ГПУ решеткой

Напряжение и деформации при всестороннем сжатии:

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij}, \quad \varepsilon_{ij} = S_{ijkl}\sigma_{kl} = -pS_{ijkl}\delta_{kl} = -pS_{ijkk}.$$

Деформация в направлении вектора, заданного в кристаллографических осях:

$$\varepsilon_{ij}n_in_j = -pS_{ijkk}n_in_j,$$

откуда выражается коэффициент линейной сжимаемости кристалла:

$$\beta_n = -\frac{\varepsilon_{ij}}{p} = S_{ijkk}n_in_j = \sum_{i,j=1}^3 S_{ij}n_i^2$$

Пусть изначально шар имел радиус  $R$ . Найдем относительное удлинение вдоль осей координат  $Ox'_1, Ox'_3$ :

$$\begin{cases} \frac{\Delta R_1}{R} = -pS_{1j}n_1^2 = -p(S_{11} + S_{12} + S_{13}) = -1.67p, \\ \frac{\Delta R_3}{R} = -pS_{i3}n_1^2 = -p(S_{31} + S_{32} + S_{33}) = -17.56p. \end{cases} \Rightarrow \frac{R_1}{R_3} = \frac{R + \Delta R_1}{R + \Delta R_3} = \frac{1 - 17.56p}{1 - 1.67p}$$

## 5. Верхняя и нижняя оценки параметров $\kappa$ , $\mu$ , $E$ , $\nu$

Для изотропных сред известно:

$$\begin{aligned} \kappa &= \frac{1}{9}C_{iikk}^0, \quad \frac{1}{\kappa} = S_{iikk}^0, \quad i, k = 1, 2, 3, \\ \mu &= \frac{1}{10}\left(C_{ikik}^0 - \frac{1}{3}C_{iikk}^0\right), \quad \frac{1}{\mu} = \frac{2}{5}\left(S_{ikik}^0 - \frac{1}{3}S_{iikk}^0\right), \quad i, k = 1, 2, 3, \\ \frac{1}{E} &= \frac{1}{9\kappa} + \frac{1}{3\mu}, \quad \nu = \frac{E}{2\mu} - 1. \end{aligned}$$

Данные выражения можно упростить, группируя парные индексы:

$$\begin{aligned} C_{iikk} &= C_{11} + C_{22} + C_{33} + 2C_{12} + 2C_{13} + 2C_{23}, \\ C_{ikik} &= C_{11} + C_{22} + C_{33} + 2C_{66} + 2C_{55} + 2C_{44}, \\ S_{iikk} &= S_{11} + S_{22} + S_{33} + 2S_{12} + 2S_{13} + 2S_{23}, \\ S_{ikik} &= S_{11} + S_{22} + S_{33} + \frac{S_{66}}{2} + \frac{S_{55}}{2} + \frac{S_{44}}{2}. \end{aligned}$$

### 5.1. Кубическая кристаллическая решетка

$$\begin{aligned}\kappa^+ &= \frac{1}{3}(C_{11} + C_{12}), & \frac{1}{\kappa^-} &= 3(S_{11} + 2S_{12}), \\ \mu^+ &= \frac{1}{5}(C_{11} - C_{12} + 3C_{44}), & \frac{1}{\mu^-} &= \frac{1}{5}(4(S_{11} - S_{12} + 3S_{44})), \\ E^+ &= \frac{1}{\frac{1}{9\kappa^-} + \frac{1}{3\mu^-}}, & E^- &= \frac{1}{\frac{1}{9\kappa^+} + \frac{1}{3\mu^+}}, \\ \nu^+ &= \frac{E^-}{2\mu^-} - 1, & \nu^- &= \frac{E^+}{2\mu^+} - 1.\end{aligned}$$

Для  $\alpha$ -Fe эти величины равны соответственно:

Таблица 2. Оценка параметров Ламе, модуля упругости и коэффициента Пуассона для железа

$\kappa^-$	$\kappa^+$	$\mu^-$	$\mu^+$	$E^-$	$E^+$	$\nu^-$	$\nu^+$
168.0	168.0	74.94	88.2	195.7	225.2	0.28	0.305

### 5.2. ГПУ

$$\begin{aligned}\kappa^+ &= \frac{1}{9}(2C_{11} + C_{33} + 2(C_{12} + 2C_{13})), & \frac{1}{\kappa^-} &= 2(S_{11} + 2S_{12}), \\ \mu^+ &= \frac{1}{30}(7C_{11} - 5C_{12} - 4C_{13} + 2C_{33} + 12C_{44}), & \frac{1}{\mu^-} &= \frac{2}{15}(7S_{11} + 2S_{33} + 3S_{44} - 5S_{12} - 4S_{13}), \\ E^+ &= \frac{1}{\frac{1}{9\kappa^-} + \frac{1}{3\mu^-}}, & E^- &= \frac{1}{\frac{1}{9\kappa^+} + \frac{1}{3\mu^+}}, \\ \nu^+ &= \frac{E^-}{2\mu^-} - 1, & \nu^- &= \frac{E^+}{2\mu^+} - 1.\end{aligned}$$



Для Cd эти величины равны соответственно:

Таблица 3. Оценка параметров Ламе, модуля упругости и коэффициента Пуассона для железа

$\kappa^-$	$\kappa^+$	$\mu^-$	$\mu^+$	$E^-$	$E^+$	$\nu^-$	$\nu^+$
47.85	64.58	18.9	25.8	50.13	68.3	0.323	0.325

## 6. Задача Эшелби

Для оценки характеристик поликристаллического материала можно использовать решение задачи Эшелби о взаимодействии с изотропной линейно-упругой сплошной средой изотропного линейно-упругого сферического или эллипсоидального включения. Для это необходимо решить систему уравнений:

$$\begin{cases} \zeta_{kkmm} = 0, \\ \zeta_{kmkm} = 0, \end{cases} \quad (4)$$

где

$$\begin{aligned} \zeta_{ijmn} &= \frac{C_{rsmn}^0 - C_{rsmn}}{C_{ijrs} - C_{ijpq}^0(I_{pqrs} - w_{pqrs})}, \\ I_{ijkl} &= \frac{1}{2}(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}), \\ w_{ijkl} &= \frac{\kappa + \frac{4\mu}{3}}{2(\kappa + 2\mu)} \left( \frac{4\mu - 3\kappa}{3\kappa} \delta_{ij}\delta_{kl} + 5I_{ijkl} \right), \\ C_{11}^0 &= \kappa + \frac{4\mu}{3}, \quad C_{12}^0 = \kappa - \frac{2\mu}{3}, \quad C_{44}^0 = \mu. \end{aligned}$$

Необходимо представить тензор (4) в виде матрицы:

$$\begin{cases} \zeta_{kkmm} = \zeta_{11} + \zeta_{22} + \zeta_{33} + 2(\zeta_{12} + \zeta_{13} + \zeta_{23}), \\ \zeta_{kmkm} = \zeta_{11} + \zeta_{22} + \zeta_{33} + 2(\zeta_{44} + \zeta_{55} + \zeta_{66}), \end{cases}$$

чтобы найти его компоненты путем решения задачи минимизации:

$$\zeta_{kkmm}^2(\kappa, \mu) + \zeta_{kmkm}^2(\kappa, \mu) \rightarrow \min. \quad (5)$$

Таблица 4. Оценка параметров Ламе, модуля упругости и коэффициента Пуассона для железа — задача Эшелби

Металл	$\kappa^{min}$	$\mu^{min}$	$E^{min}$	$\nu^{min}$
Fe	168	83.4	214.7	0.286
Cd	55	22.13	59.5	0.322

## 7. Задача с пористым двухфазным сплавом-смесью

Проведем аналогичные расчеты и построим графики для пористого двухфазного сплава-смеси пары металлов Fe и Cd при фиксированных значениях объемной пористости в зависимости от отношения  $V_1/(V_1 + V_2) \in [0, 1]$ , где  $V_1$  и  $V_2$  — объемные доли железа и кадмия в сплаве соответственно,  $V_3$  — объемная пористость,  $V_1 + V_2 + V_3 = 1$ .

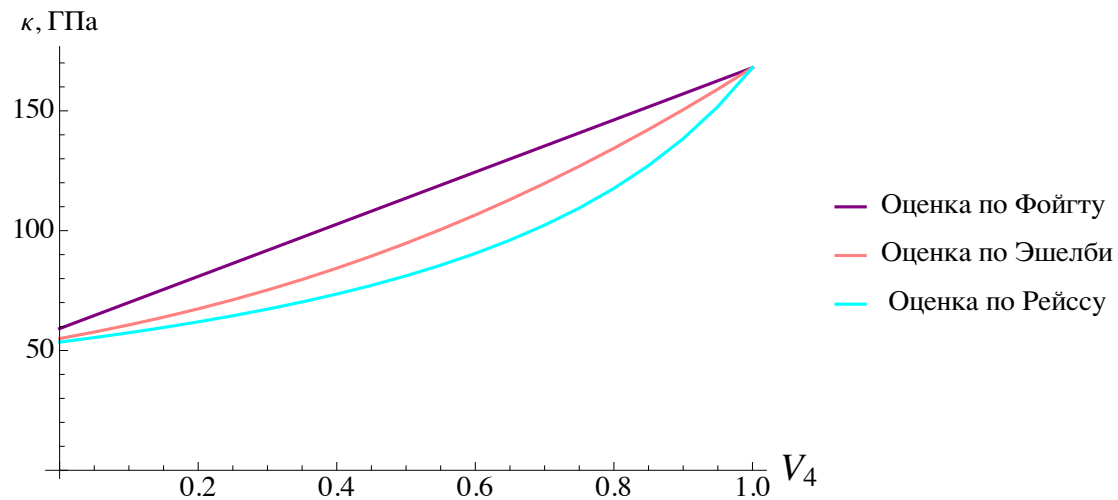
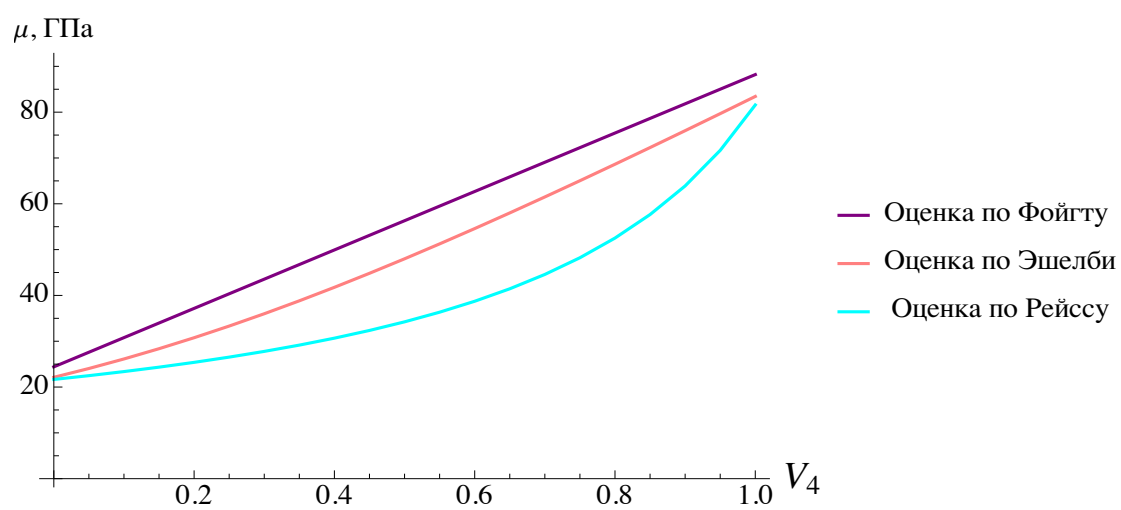
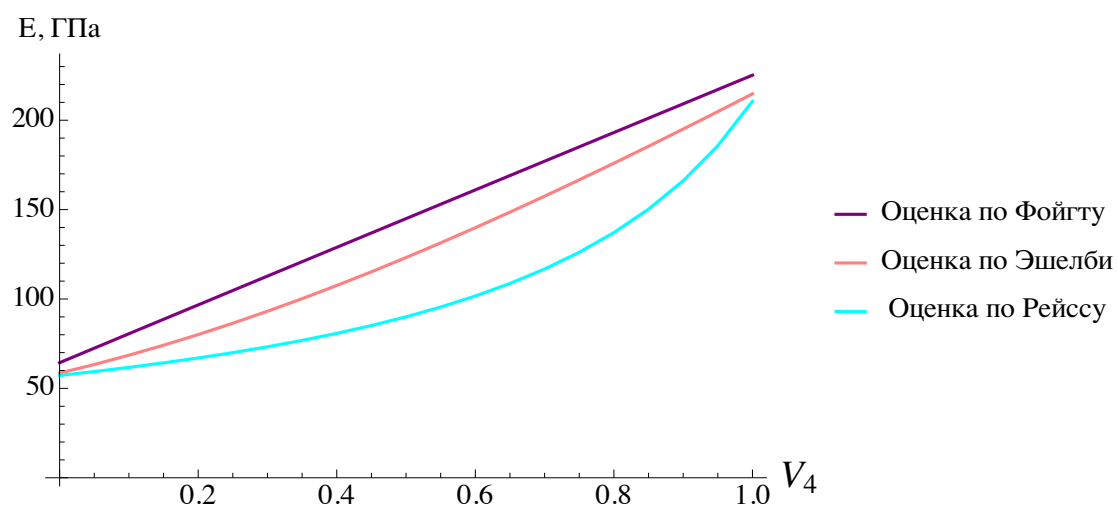
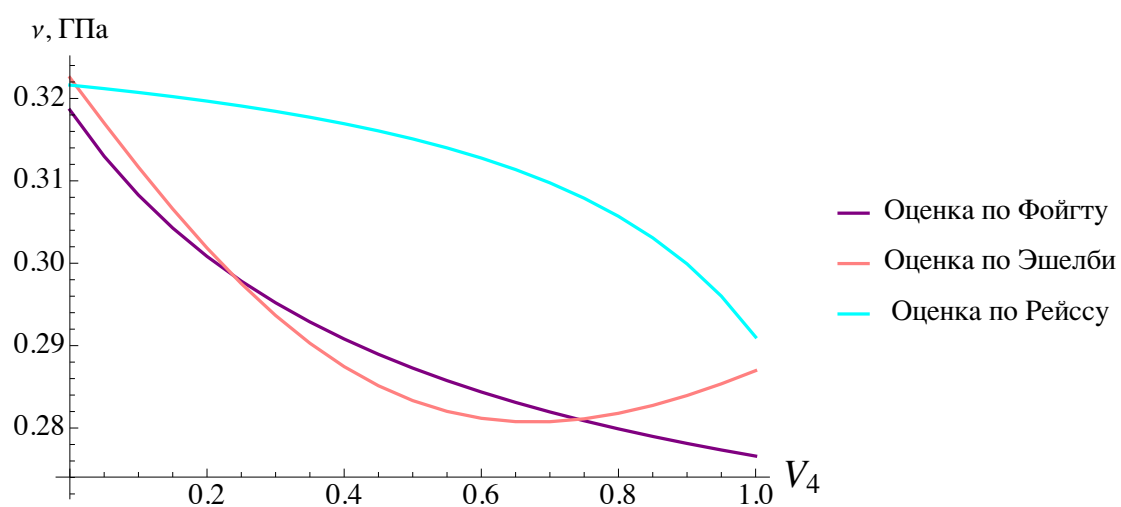
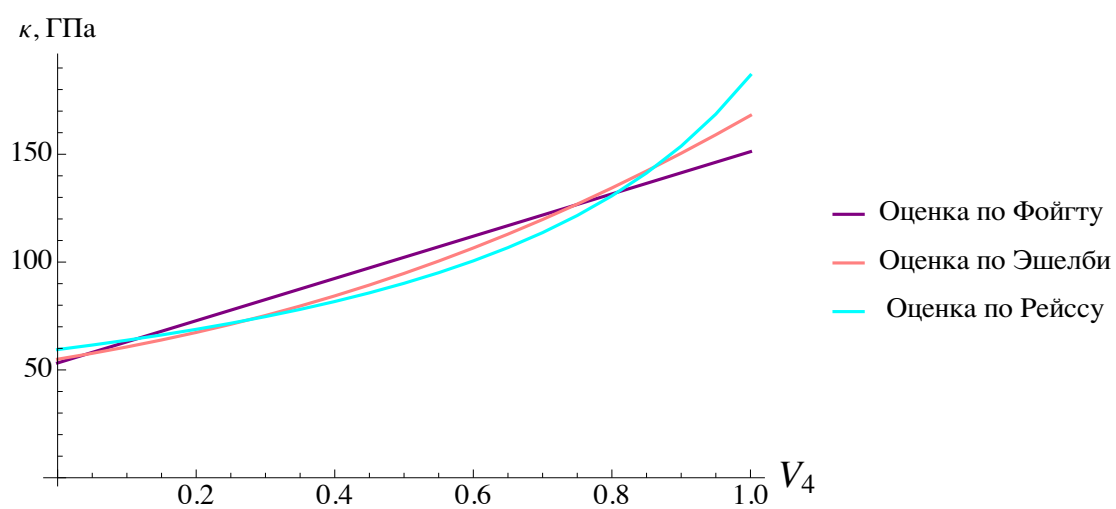
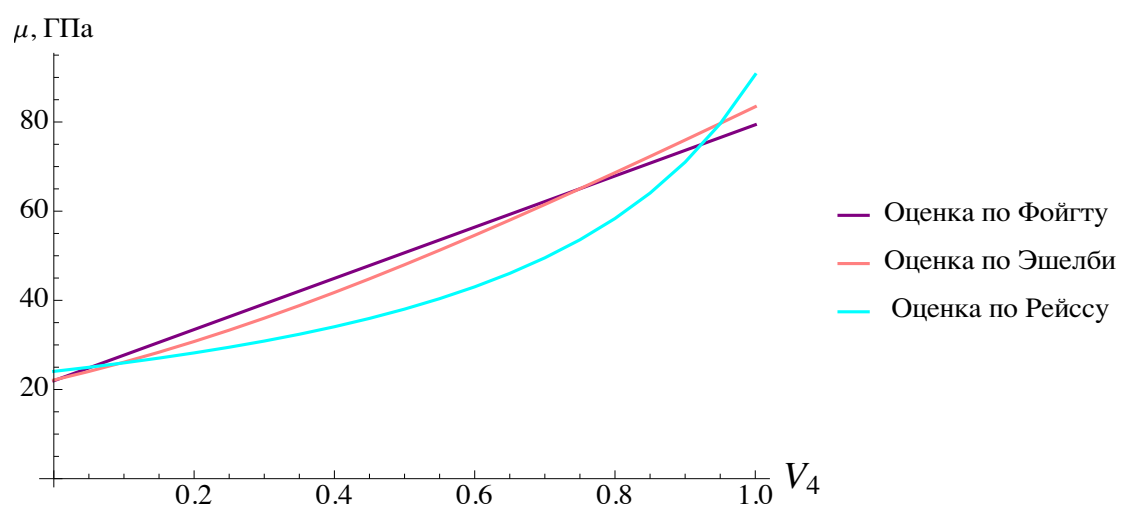
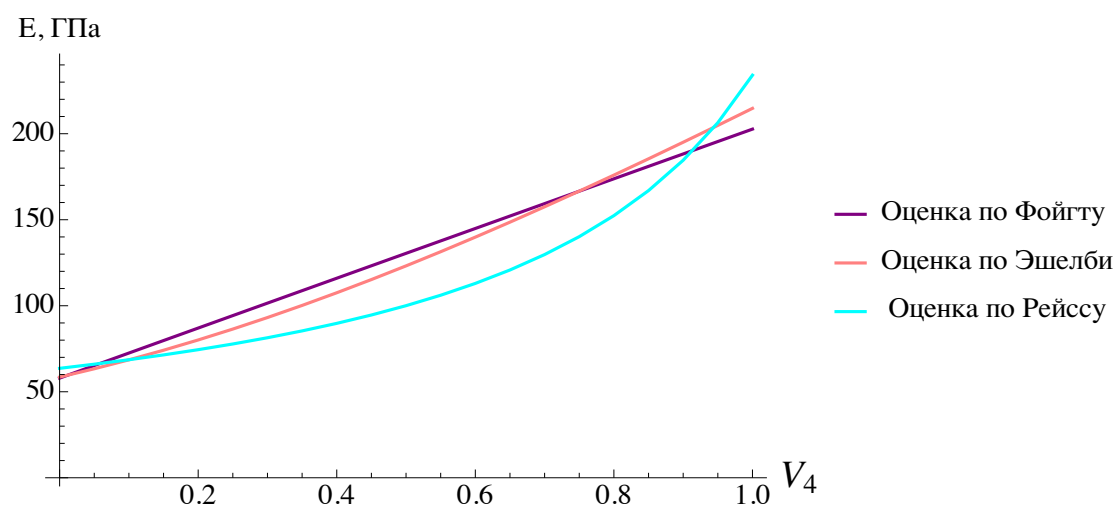
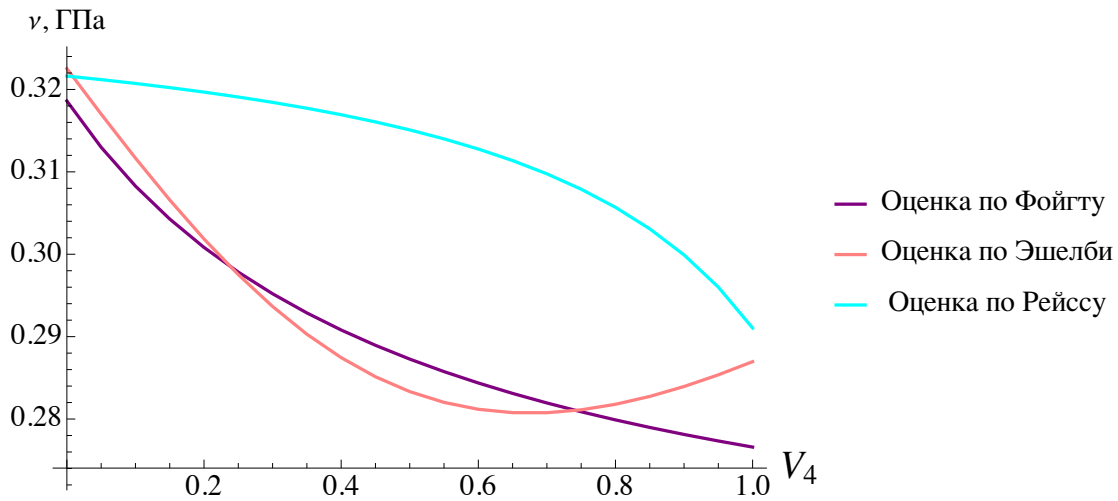


Рис. 6. График  $\kappa(V_4)$ ,  $V_3 = 0$

Рис. 7. График  $\mu(V_4), V_3 = 0$ Рис. 8. График  $E(V_4), V_3 = 0$

Рис. 9. График  $\nu(V_4), V_3 = 0$ Рис. 10. График  $\kappa(V_4), V_3 = 0.1$

Рис. 11. График  $\mu(V_4), V_3 = 0.1$ Рис. 12. График  $E(V_4), V_3 = 0.1$

Рис. 13. График  $\nu(V_4)$ ,  $V_3 = 0.1$ 

## 8. Заключение

Для заданной пары металлов были вычислены коэффициенты матриц упругости и податливости с приведением сравнения точности. Построили графики зависимостей линейной податливости от направления единичного вектора в различных плоскостях для гексагональной плотной упаковки и кубической решеток, определена линия, вдоль которой линейная податливость имеет экстремальные значения. Для каждого из металлов в предположении хаотической ориентации зерен в поликристалле найдены верхняя и нижняя оценки модуля объемной упругости и проведено сравнение полученных значений с вычисленными для случая статистически усредненной шаровой формы кристаллических зерен. Найдены верхняя и нижняя оценки модуля объемной упругости и построены графики для пористого двухфазного сплава-смеси заданной пары металлов при различных значениях объемной пористости. Рассмотрели отношения удлинения вдоль осей для металла с ГПУ решеткой.

## Список литературы

1. Зарубин В.С. Математические модели механики и электродинамики сплошной среды. В.С. Зарубин, Г.Н. Кувыркин Москва: Издательство МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2008. 512 с.
2. Зарубин В.С. Прикладные задачи термпрочности элементов конструкций. Москва: Машиностроение, 1985. 296 с.
3. Зарубин В.С. Физические и математические модели микромеханики: учебное пособие. В.С. Зарубин, Г.Н. Кувыркин, И.Ю. Савельева Москва: Москва: Издательство МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2020. 194 с.