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
α-*Fe*+*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

Для заданной пары чистых металлов (α-Fe – железо, Cd – кадмий) по значению коэффициентов упругости (или податливости) кристаллов вычислить элементы матрицы коэффициентов податливости (или упругости), сравнив 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 $\dfrac{V_1}{(V_1+V_2)} \in [0;1]$, где V_1 и V_2 — объемные доли металлов в сплаве.

Таблица 1. Коэффициенты упругости и податливости

α-Fe	C_{11}	C_{12}	C_{14}
ГПа	234	135	114

Cd	S_{11}	S_{12}	S_{13}	S_{33}	S_{44}
ТПа$^{-1}$	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 $\vec{n}$
σ_{kl}	— компоненты тензора напряжений $\hat{\sigma}$ $(k, l = \overline{1,3})$
S_{ijkl}	— компоненты тензора податливости $\hat{S}$ $(i, j, k, l = \overline{1,3})$
ε_{kl}	— компоненты тензора малой деформации $\hat{\varepsilon}$ $(k, l = \overline{1,3})$
p	— давление
δ_{ij}	— символ Кронекера
V_0	— контрольный объем
I_{ijkl}	— единичный тензор 4-го ранга $(i, j, k, l = \overline{1,3})$
ν	— коэффициент Пуассона
C_{ijkl}	— компоненты тензора коэффициентов упругости $\hat{C}$ $(i, j, k, l = \overline{1,3})$
C^o_{ijkl}	— эффективные упругие характеристики поликристалла $(i, j, k, l = \overline{1,3})$
S^o_{ijkl}	— эффективные характеристики податливости поликристалла $(i, j, k, l = \overline{1,3})$
ω_{ijkl}	— тензор Эшелби $(i, j, k, l = \overline{1,3})$
E	— модуль Юнга, ГПа
μ	— модуль сдвига, ГПа
$\varkappa$	— модуль объемной упругости, ГПа

1. Матрицы податливости и упругости для различных типов решеток

1.1. Кубическая решетка

В кристаллах с кубической решеткой матрицы коэффицентов 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:

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

Пользуясь системой компьютерной алгебры Wolfram Mathematica, получим эти значения:

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

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:

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

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

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:

$$S_n = S_{11} - S_{44}(S^* - 1)(n_1^2 n_2^2 + n_2^2 n_3^2 + n_3^2 n_1^2), \tag{1}$$
$$S^* = 2\frac{S_{11} - S_{12}}{S_{44}}.$$

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:

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

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 $\gamma = \left(\widehat{\vec{n}, Ox_3'}\right)$, $\gamma \in \left[0, \frac{\pi}{2}\right]$.

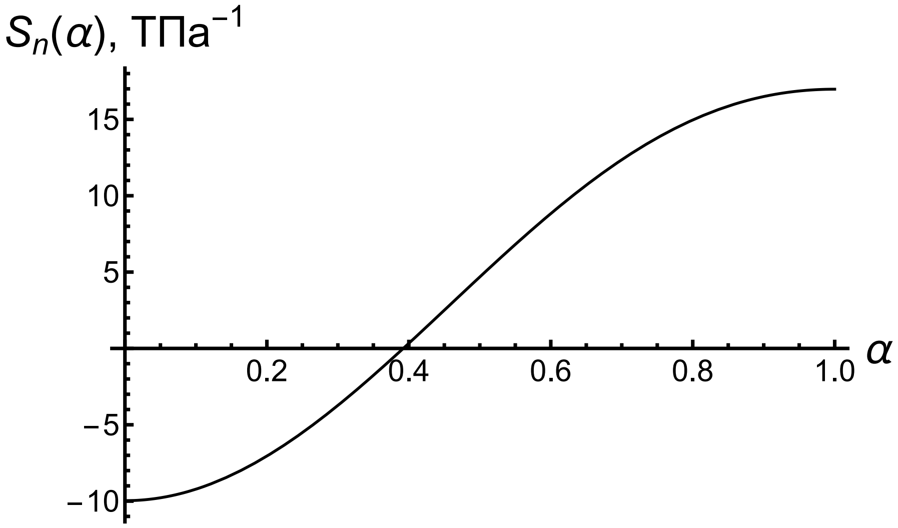

Рис. 1. График линейной податливости в плоскости, содержащей оптическую ось кристалла

2.2. Линейная податливость для α-Fe (Кубическая кристаллическая решетка)

2.2.1. Единичный вектор в плоскости грани

Есть три плоскости, содержащие начало координат кристаллографической системы:

1. $\vec{n} \in \pi_1 : n_3 = 0,\ n_1 = \cos\alpha,\ n_2 = \sin\alpha,\ \alpha \in \left[0;\ \dfrac{\pi}{2}\right]$.

2. $\vec{n} \in \pi_2 : n_2 = 0,\ n_1 = \cos\beta,\ n_3 = \sin\beta,\ \beta \in \left[0;\ \dfrac{\pi}{2}\right]$.

3. $\vec{n} \in \pi_3 : n_1 = 0,\ n_2 = \cos\gamma,\ n_3 = \sin\gamma,\ \gamma \in \left[0;\ \dfrac{\pi}{2}\right]$.

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

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

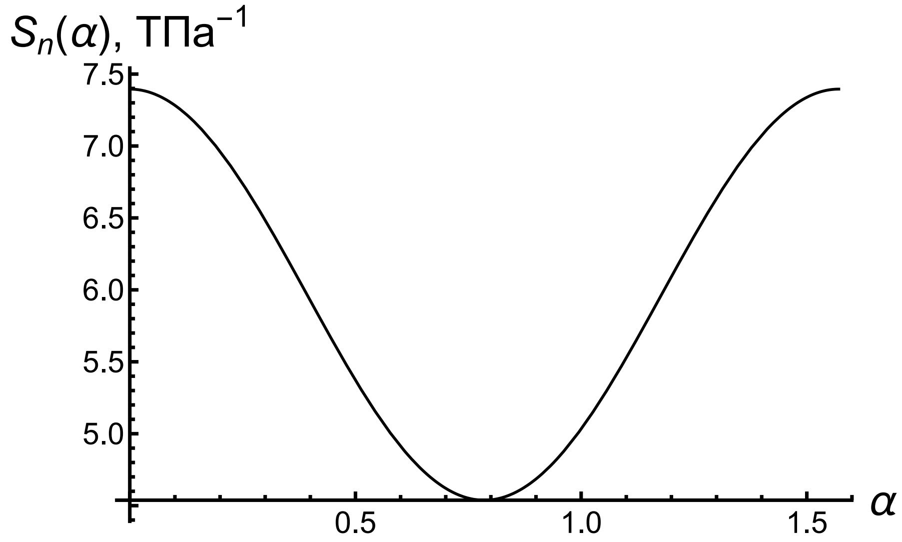

Рис. 2. График линейной податливости в плоскости грани куба

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

Пусть первая диагональ лежит в лоскости π_2, вторая — в π_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:

$$\vec{e_1} = \frac{\vec{b_1}}{\|\vec{b_1}\|} = \sqrt{2}(\vec{i}+\vec{k}),$$

$$\vec{d_2} = \vec{b_2} - \langle\vec{e_1},\vec{b_2}\rangle\vec{e_1} = -\frac{1}{2}\vec{i}+\vec{j}+\frac{1}{2}\vec{k},$$

$$\vec{e_2} = \frac{\vec{d_2}}{\|\vec{d_2}\|} = -\frac{1}{6}\vec{i}+\sqrt{\frac{2}{3}}\vec{j}+\frac{1}{\sqrt{6}}\vec{k}.$$

Тогда вектор $\vec{e_3}$ определим:

$$\vec{e_3} = \vec{e_1}\times\vec{e_2} = -\frac{1}{\sqrt{3}}\vec{i}-\frac{1}{\sqrt{3}}\vec{j}+\frac{1}{\sqrt{3}}\vec{k}.$$

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

Тогда получим

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

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

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

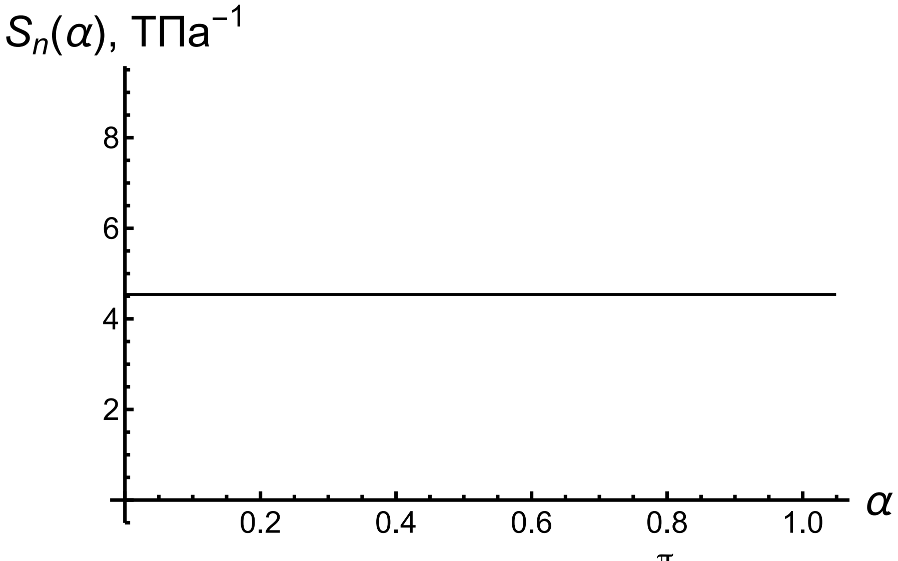

Рис. 3. График $\S_n(\alpha), 0 \le \alpha \le \dfrac{\pi}{3}$

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

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

Пусть диагональ грани лежит в плоскости π_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 рассматриваем плоскости. Но они не ортогональны, так как $\cos\left(\widehat{\vec{b}_1, \vec{b}_2}\right) = \sqrt{\frac{2}{3}}$. Применим к ним процесс ортогонализации Грама-Шмидта.

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

$$\vec{d}_2 = \vec{b}_2 - \langle \vec{e}_1, \vec{b}_2 \rangle \vec{e}_1 = \vec{j},$$

$$\vec{e}_2 = \vec{j}.$$

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

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

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

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

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

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

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

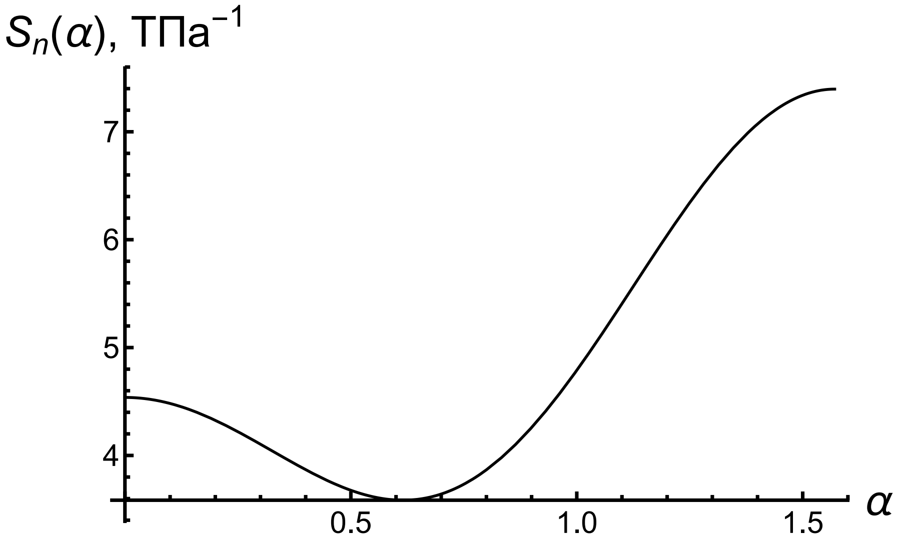

Рис. 4. График $S_n(\alpha), 0 \leq \alpha \leq \dfrac{\pi}{2}$

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 соответсвенно, а следовательно, и в рассматриваемой плоскости. Но они не ортогональны, так как $\cos\left(\widehat{\vec{e}_1, \vec{b}_2}\right) = \dfrac{1}{\sqrt{3}}$. Применим к ним процесс ортогонализации Грама-Шмидта:

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

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

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

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

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

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

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

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

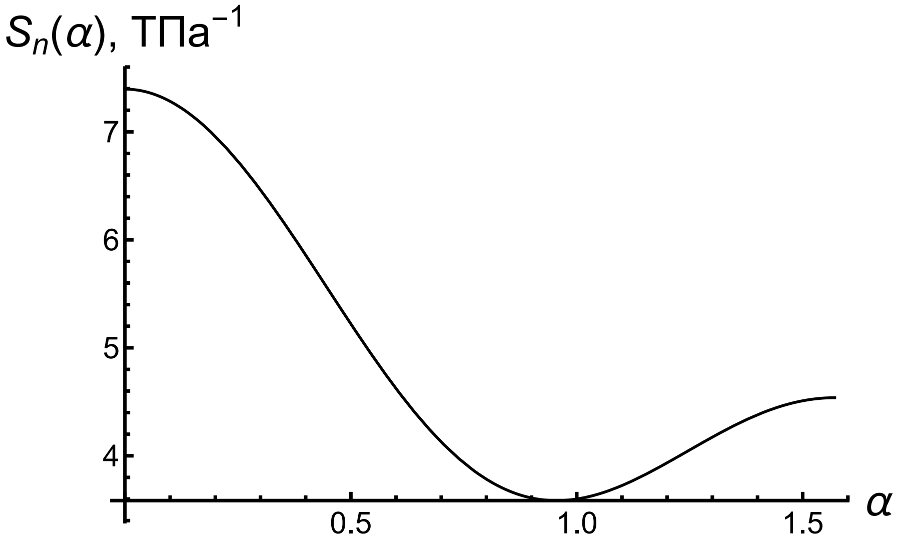

Рис. 5. График $S_n(\alpha), 0 \le \alpha \le \frac{\pi}{2}$

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 π 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:

$$\text{Fe}\colon \begin{cases} S_{11} - (2(S_{11} - S_{12}) - S_{44})[n_1^2 n_2^2 + n_1^2 n_3^2 + n_2^2 n_3^2] \to \max(\min), \\ n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = 1, \end{cases}$$

$$\text{Cd}\colon \begin{cases} S_{11}(1 - n_3^2) + S_{33} n_3^2 + 2(S_{13} + S_{44})(1 - n_3^2) n_3^2 \to \max(\min), \\ n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = 1. \end{cases}$$

Для железа получаем:

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

Для кадмия получаем:

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

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:

$$\varepsilon_{ij} n_i n_j = -p S_{ijkk} n_i n_j,$$

откуда выражается коэффициент линейной сжимаемости кристалла:

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

Пусть изначально шар имел радиус R. Найдем относительное удлинение вдоль осей координат Ox_1', Ox_3':

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

5. Верхняя и нижняя оценки параметров $\varkappa$, μ, E, ν

Для изотропных сред известно:

$$\varkappa = \frac{1}{9} C_{iikk}^0, \quad \frac{1}{\varkappa} = S_{iikk}^0, \qquad i,k = 1,2,3,$$

$$\mu = \frac{1}{10}\Big(C_{ikik}^0 - \frac{1}{3} C_{iikk}^0\Big), \quad \frac{1}{\mu} = \frac{2}{5}\Big(S_{ikik}^0 - \frac{1}{3} S_{iikk}^0\Big), \qquad i,k = 1,2,3,$$

$$\frac{1}{E} = \frac{1}{9\varkappa} + \frac{1}{3\mu}, \quad \nu = \frac{E}{2\mu} - 1.$$

Данные выражения можно упростить, группируя парные индексы:

$$C_{iikk} = C_{11} + C_{22} + C_{33} + 2C_{12} + 2C_{13} + 2C_{23},$$

$$C_{ikik} = C_{11} + C_{22} + C_{33} + 2C_{66} + 2C_{55} + 2C_{44},$$

$$S_{iikk} = S_{11} + S_{22} + S_{33} + 2S_{12} + 2S_{13} + 2S_{23},$$

$$S_{ikik} = S_{11} + S_{22} + S_{33} + \frac{S_{66}}{2} + \frac{S_{55}}{2} + \frac{S_{44}}{2}.$$

5.1. Кубичесукая кристаллическая решетка

$$\varkappa^+ = \frac{1}{3}(C_{11} + C_{12}), \quad \frac{1}{\varkappa^-} = 3(S_{11} + 2S_{12}),$$

$$\mu^+ = \frac{1}{5}(C_{11} - C_{12} + 3C_{44}), \quad \frac{1}{\mu^-} = \frac{1}{5}(4(S_{11} - S_{12} + 3S_{44}),$$

$$E^+ = \frac{1}{\frac{1}{9\varkappa^-} + \frac{1}{3\mu^-}}, \quad E^- = \frac{1}{\frac{1}{9\varkappa^+} + \frac{1}{3\mu^+}},$$

$$\nu^+ = \frac{E^-}{2\mu^-} - 1, \quad \nu^- = \frac{E^+}{2\mu^+} - 1.$$

Для α-Fe эти величины равны соответственно:

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

$\varkappa^-$	$\varkappa^+$	μ^-	μ^+	E^-	E^+	ν^-	ν^+
168.0	168.0	74.94	88.2	195.7	225.2	0.28	0.305

5.2. ГПУ

$$\varkappa^+ = \frac{1}{9}(2C_{11} + C_{33} + 2(C_{12} + 2C_{13})), \quad \frac{1}{\varkappa^-} = 2(S_{11} + 2S_{12}),$$

$$\mu^+ = \frac{1}{30}(7C_{11} - 5C_{12} - 4C_{13} + 2C_{33} + 12C_{44}), \quad \frac{1}{\mu^-} = \frac{2}{15}(7S_{11} + 2S_{33} + 3S_{44} - 5S_{12} - 4S_{13}),$$

$$E^+ = \frac{1}{\frac{1}{9\varkappa^-} + \frac{1}{3\mu^-}}, \quad E^- = \frac{1}{\frac{1}{9\varkappa^+} + \frac{1}{3\mu^+}},$$

$$\nu^+ = \frac{E^-}{2\mu^-} - 1, \quad \nu^- = \frac{E^+}{2\mu^+} - 1.$$

Для Cd эти величины равны соответственно:

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

$\varkappa^-$	$\varkappa^+$	μ^-	μ^+	E^-	E^+	ν^-	ν^+
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:

$$\begin{cases} \zeta_{kkmm} = 0, \\ \zeta_{kmkm} = 0, \end{cases} \tag{4}$$

где

$$\zeta_{ijmn} = \frac{C^0_{rsmn} - C_{rsmn}}{C_{ijrs} - C^0_{ijpq}(I_{pqrs} - w_{pqrs})},$$

$$I_{ijkl} = \frac{1}{2}(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}),$$

$$w_{ijkl} = \frac{\varkappa + \frac{4\mu}{3}}{2(\varkappa + 2\mu)}\Big(\frac{4\mu - 3\varkappa}{3\varkappa}\delta_{ij}\delta_{kl} + 5I_{ijkl}\Big),$$

$$C^0_{11} = \varkappa + \frac{4\mu}{3}, \quad C^0_{12} = \varkappa - \frac{2\mu}{3}, \quad C^0_{44} = \mu.$$

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:

$$\zeta^2_{kkmm}(\varkappa, \mu) + \zeta^2_{kmkm}(\varkappa, \mu) \to \min. \tag{5}$$

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

Металл	$\varkappa^{min}$	μ^{min}	E^{min}	ν^{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 $V1/(V1+V2) \in [0,1]$, где $V1$ и $V2$ – объемные доли железа и кадмия в сплаве соответственно, $V3$ — объемная пористость, $V1+V2+V3=1$.

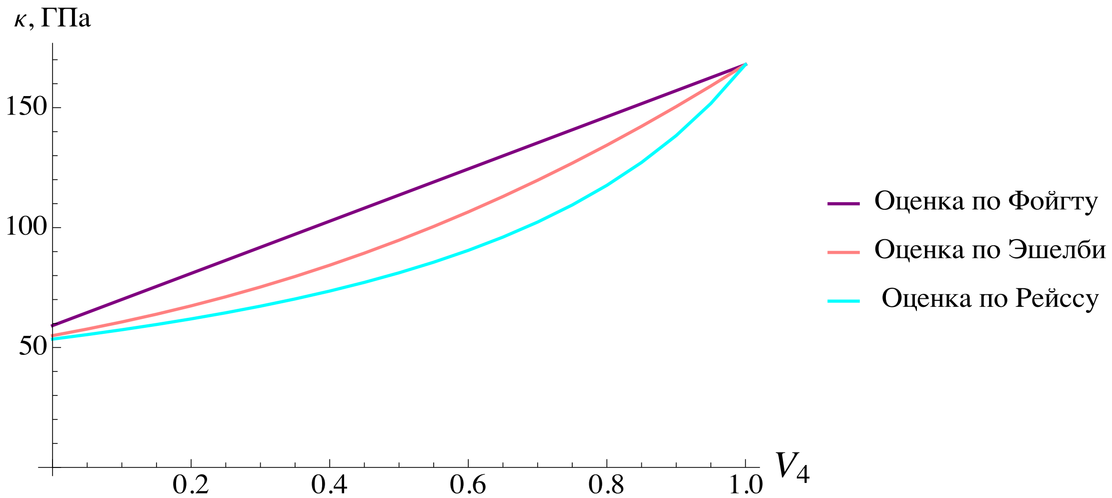

Рис. 6. График $\varkappa(V_4), V_3 = 0$

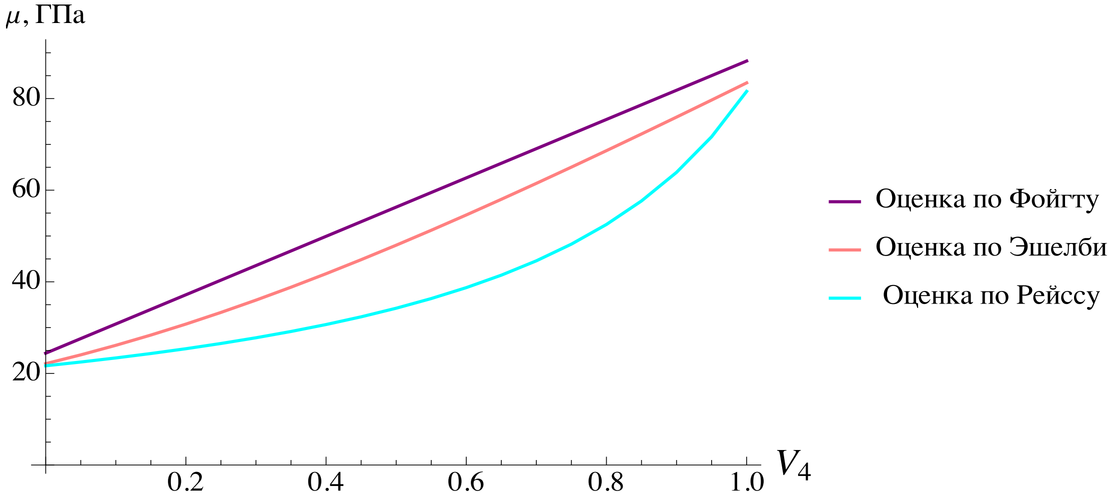

Рис. 7. График $\mu(V_4), V_3 = 0$

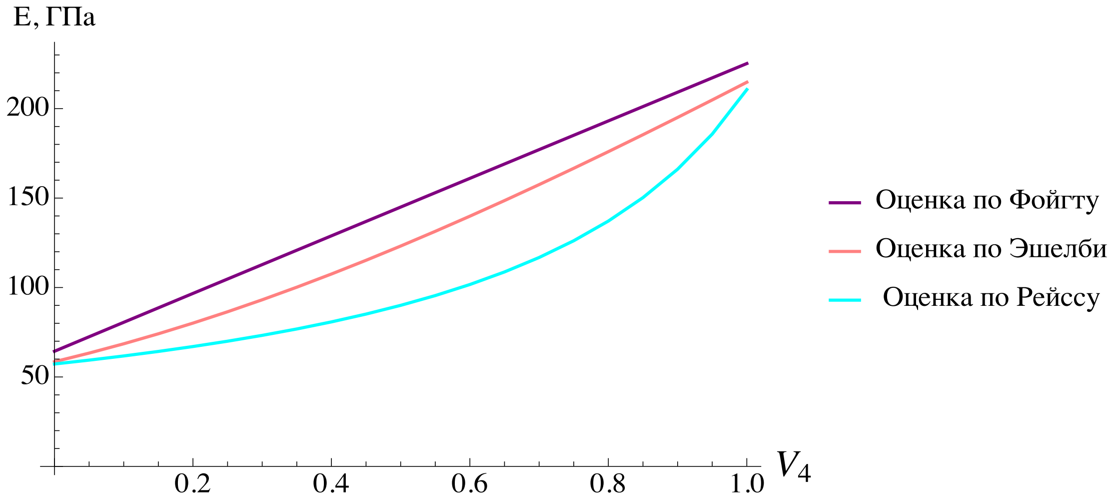

Рис. 8. График $E(V_4), V_3 = 0$

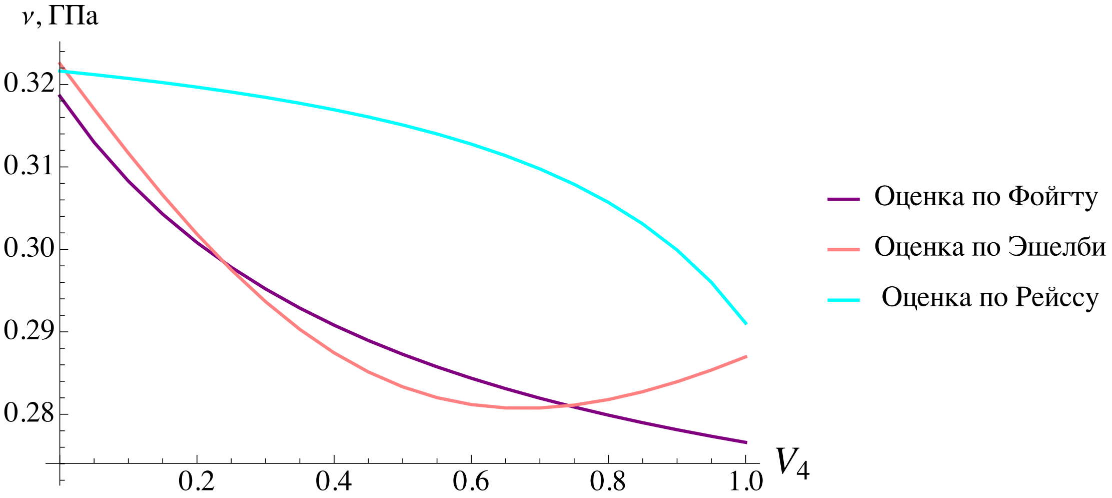

Рис. 9. График $\nu(V_4), V_3 = 0$

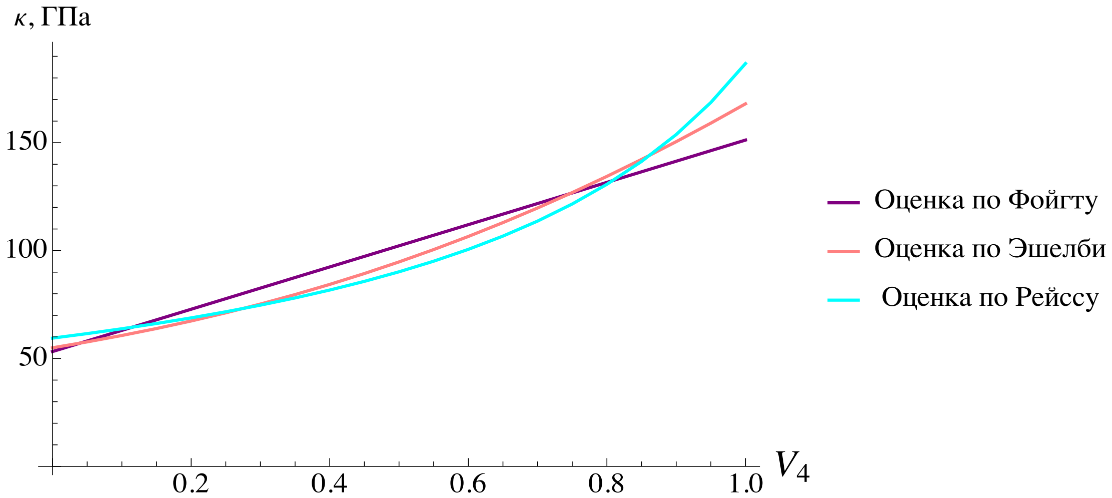

Рис. 10. График $\varkappa(V_4), V_3 = 0.1$

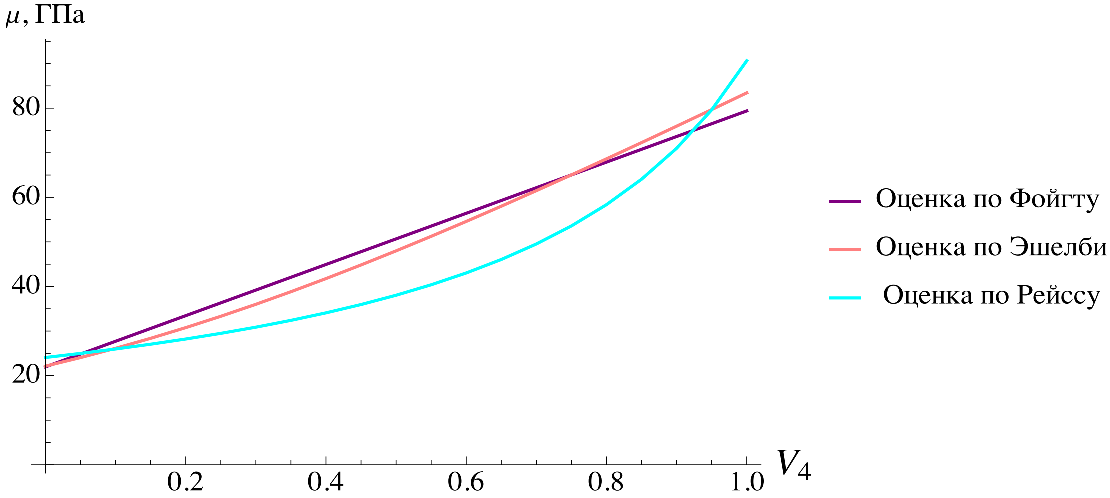

Рис. 11. График $\mu(V_4), V_3 = 0.1$

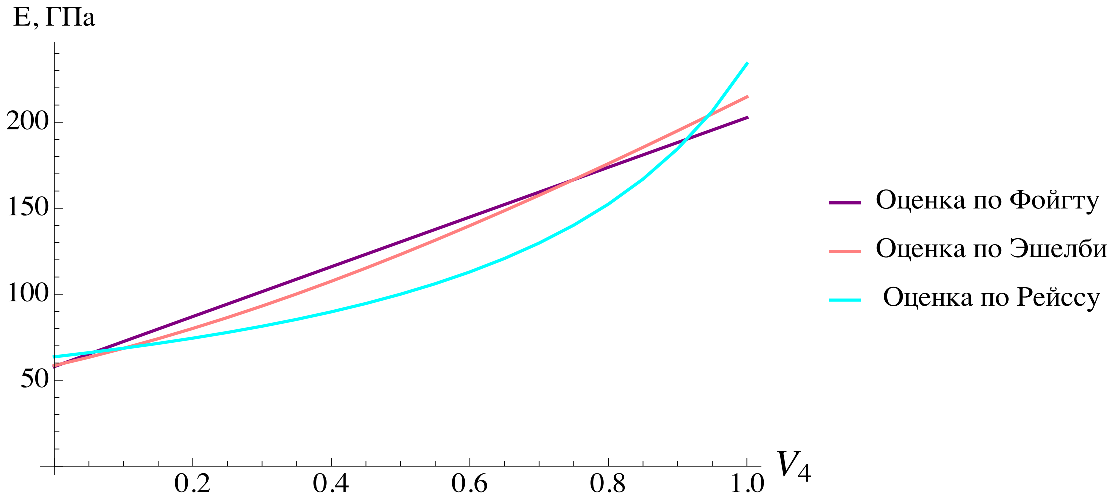

Рис. 12. График $E(V_4), V_3 = 0.1$

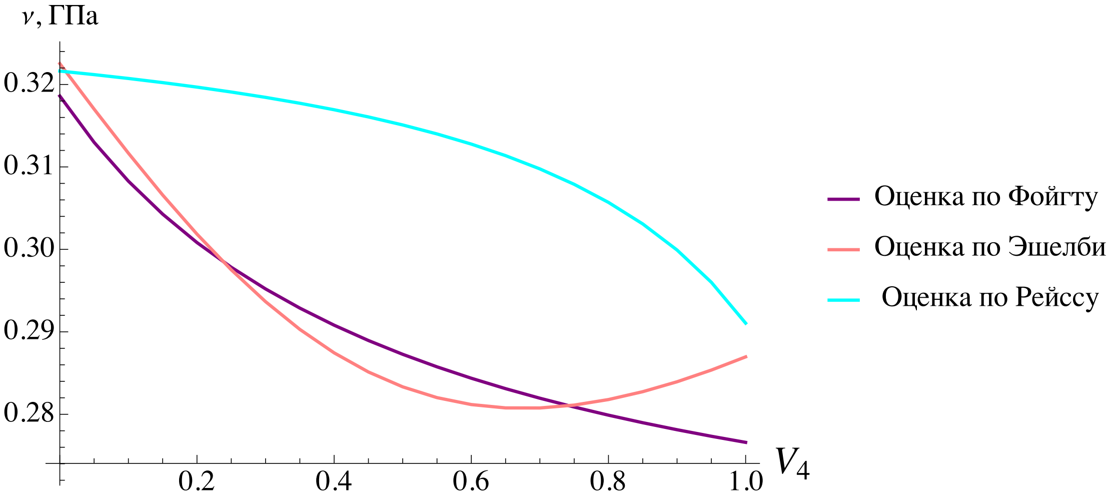

Рис. 13. График $\nu(V_4), V_3 = 0.1$

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 упако- ванной 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 упруго- сти 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 термопрочности 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.