О двусторонних оценках термомеханических и теплофизических свойств неоднородных материалов

Ефименко А.В., Зарубин В.С., Кувыркин Г.Н.

Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана

При создании современных теплонапряженных конструкций, работающих в условиях высоких нагрузок и значительных перепадов температур, широко применяют композиционные материалы. Такие материалы неоднородны по структуре, а их компоненты имеют различные форму, ориентацию в пространстве, термомеханические и теплофизические свойства. К микронеоднородным относят поликристаллические металлы и сплавы, кристаллические зерна которых анизотропны и имеют различную пространственную ориентацию кристаллографических осей. При случайной ориентации отдельных компонентов композита или зерен поликристаллов материал в целом можно считать макроскопически изотропным. Прогнозу термомеханических и теплофизических характеристик макроскопически изотропного неоднородного материала по свойствам составляющих его компонентов или зерен посвящено большое число работ, обзор которых можно найти в [1-4].

Известные подходы к прогнозированию термомеханических и теплофизических характеристик неоднородных материалов либо вообще не позволяют получить количественную оценку достоверности прогноза по сравнению с возможными истинными значениям этих характеристик, либо дают слишком широкую "вилку" возможных значений. Необходимость такой оценки особенно актуальна при существенном контрасте свойств компонентов неоднородного материала и значительном проявлении анизотропии этих свойств.

Один из подходов к количественной оценке прогноза состоит в использовании для неоднородного материала двойственной вариационной формулировки линейных задач теплопроводности и термоупругости, содержащей функционалы с совпадающими стационарными значениями, но достигающие в своих стационарных точках (отмечены "звездочками") альтернативных экстремумов [4]:

$$J(T) = 1/2 \int_V \lambda_{ij} T_{,j} T_{,i}\, dV - \int_{S_q} T q_i^\circ n_i\, dS \ge J\left(T^*\right) = J\left(q^*\right) \ge$$
$$\ge -\frac{1}{2}\int_V r_{ij} q_i q_j\, dV - \int_{S_T} T^\circ q_i n_i\, dS = J(q) \qquad (1)$$

$$T \in C(V) \cap C_i(V_n), \quad \bigcup_n V_n = V; \qquad T = T^\circ \text{ на } S_T \qquad (2)$$

$$q_{i,i} = 0 \text{ в } V; \quad q_i = q_i^\circ \text{ на } S_q; \quad S_T \cap S_q = S; \quad S_T \cap S_q = \varnothing \qquad (3)$$

$$J(u) = \int_V \left[\frac{1}{2} C_{ijkl}\varepsilon_{ij}\varepsilon_{kl} - \varepsilon_{ij}\beta_{ij}\Delta T - c_V \frac{(\Delta T)^2}{2T_0}\right] dV - \int_{S_p} p_i^\circ u_i\, dS \ge J\left(u^*\right) =$$
$$= J\left(\sigma^*\right) \ge -\int_V \left[\frac{1}{2} S_{ijkl}\sigma_{ij}\sigma_{kl} + \sigma_{ij}\alpha_{ij}\Delta T + \frac{(\Delta T)^2}{2T_0}\right] dV + \int_{S_u} \sigma_{ij} n_j u_i^\circ\, dS = J(\sigma) \qquad (4)$$

$$u_i \in C(V) \cap C_1(V_n), \quad \bigcup_n V_n = V; \qquad u_i = u_i^\circ \text{ на } S_u; \qquad (5)$$

$$\sigma_{ij,j} = 0 \ \text{ в } \ V; \quad \sigma_{ij} n_j = p_i^{\circ} \ \text{ на } \ S_p; \quad S_u \cap S_p = S; \quad S_u \cap S_p = \varnothing \qquad (6)$$

$$i, j, k, l = 1, 2, 3$$

Здесь V и S − рассматриваемый объем неоднородного материала и охватывающая этот объем замкнутая поверхность; n_i − направляющие косинусы внешней к S нормали в прямоугольных декартовых координатах; T и q_i − температура и компоненты вектора **q** плотности теплового потока; λ_{ij} и r_{ij} − компоненты тензора теплопроводности и обратного ему тензора термического сопротивления; c_p и c_v − удельные объемные теплоемкости при постоянных напряжениях и деформациях; ΔT − однородное в V изменение температуры, малое по сравнению с некоторым ее значением T_0; ε_{ij} и α_{ij} − компоненты тензоров полной деформации и линейного расширения; u_i и σ_{ij} − компоненты вектора **u** перемещений и тензора **σ** напряжений; p_i° − компоненты заданного на участках S_p поверхности S вектора распределенной нагрузки (верхний индекс "градус" отмечает также распределения T, q_i и u_i соответственно на участках S_T, S_q и S_u поверхности S); C_{ijkl} и S_{ijkl} − компоненты тензора коэффициентов упругости и обратного ему тензора коэффициентов податливости $\beta_{ij}=C_{ijkl}\alpha_{kl}$. Неоднородный материал состоит из N компонентов, каждый из которых занимает объем V_n, $n=0,1,...;N$. В соотношениях (1), (3), (4), (6) и далее предполагается суммирование по повторяющимся нижним индексам, а запятая перед индексом означает дифференцирование по соответствующей пространственной координате.

Построение в неоднородной среде полей температур и тепловых потоков, перемещений и напряжений, удовлетворяющих условиям (2), (3), (5) и (6), т.е. допустимых для входящих в неравенства (1) и (4) функционалов, позволяет для макроскопически изотропного материала с произвольными анизотропией и контрастом свойств его компонентов получить двусторонние оценки истинных значений таких теплофизических и термомеханических характеристик, как коэффициенты теплопроводности λ и линейного расширения α, теплоемкости при постоянных напряжениях и деформациях, модули сдвига G и всестороннего сжатия K при изотермических условиях деформирования. Последовательность операций аналогична для любой из характеристик.

При однородных полях градиента температуры и плотности теплового потока из (1) следуют оценки [4]

$$\lambda_+ = \sum_{n=1}^{N} \nu_n \lambda_{ii}^{(n)} \Big/ 3 \geq \lambda \geq 3 \Big/ \sum_{n=1}^{N} \nu_n r_{ii} = \lambda_- \qquad (7)$$

где $\nu_n = V_n / V$, а верхним индексом n отмечены характеристики n-го компонента материала. Оценки (7) можно улучшить с помощью формулы [1]

$$\lambda^* = -2\lambda_c + 1 \Big/ \sum_{n=1}^{N} \nu_n \delta_{ij} \left(\lambda_{ij}^{(n)} + 2\lambda_c \delta_{ij} \right)^{-1} \qquad (8)$$

где λ^* и λ_c - эффективная теплопроводность неоднородного материала и теплопроводность среды сравнения, δ_{ij} - символ Кронекера.

С учетом того, что $\sum\limits_{n=1}^{N} \nu_n = 1$, нетрудно (8) привести к виду

$$\sum_{n=1}^{N} \nu_n \left(\lambda^* \delta_{ij} - \lambda_{ij} \right) \left[\lambda_c \delta_{ij} + \lambda_{ij} \right]^{-1} = 0 \quad \text{или} \quad \sum_{n=1}^{N} \nu_n \left(\lambda^* \delta_{ij} - \lambda_{ij} \right) \left[\delta_{ij} + \lambda_{ij} / \lambda_c \right]^{-1} = 0.$$

Отсюда при λ_c=0 следует $\lambda^* = \lambda_-$, а при $\lambda_c \to \infty$ − $\lambda^* = \lambda_+$.

Если среди главных коэффициентов теплопроводности $\lambda_1^{(n)}$, $\lambda_2^{(n)}$ и $\lambda_3^{(n)}$, каждого компонента неоднородного материала выбрать

$$\lambda_c = \max_n \{\lambda_1^{(n)},\lambda_2^{(n)},\lambda_3^{(n)}\} \text{ или } \lambda_c = \min_n \{\lambda_1^{(n)},\lambda_2^{(n)},\lambda_3^{(n)}\},$$

то из (8) соответственно получим значения λ_+^* или λ_-^*, причем

$$\lambda_+ \ge \lambda_+^* \ge \lambda \ge \lambda_-^* \ge \lambda_- .$$

Этот результат следует из вариационного принципа Хашина-Штрикмана [5] применительно к задаче стационарной теплопроводности.

В силу монотонной зависимости λ^* от λ_c следует ожидать, что если в (8) принять сначала $\lambda_c = \lambda_+$ получить $\lambda^* = \lambda_1$, затем принять $\lambda_c = \lambda_1$ и получить $\lambda^* = \lambda_2$ и т.д., то значения λ_1, λ_2, ... образуют невозрастающую последовательность. Аналогичным ообразом, если в (8) принять сначала $\lambda_c = \lambda_-$, то получим неубывающую последовательность. Эти последовательности имеют общим пределом значение λ_0, которое можно найти из (8) при условии $\lambda_c = \lambda^* = \lambda_0$. Характерно, что значение λ_0 следует из (1) непосредственно, если использовать самосогласованную модель неоднородного материала [4]. Она учитывает взаимодействие с изотропной матрицей отдельно взятого сферического включения, свойства которого соответствует каждому из компонентов материала. Это позволяет построить в матрице и включении распределения температуры и плотности теплового потока, допустимые для функционалов в (1) и содержащие неизвестное значение коэффициента теплопроводности матрицы, которое отождествляется с коэффициентом теплопроводности неоднородного материала.

Таблица 1

A	Λ_-	Λ_-^*	Λ	Λ_+^*	Λ_+
0	0	0	0.5000	0.5714	0.6667
0.1	0.2500	0.4000	0.5854	0.6250	0.7000
0.25	0.5000	0.6250	0.6830	0.7000	0.7500
0.5	0.7500	0.8000	0.8090	0.8125	0.8333
0.75	0.9000	0.9107	0.9114	0.9118	0.9167
1	1	1	1	1	1
1.5	1.1250	1.1500	1.1514	1.1538	1.1667
2	1.200	1.2727	1.2808	1.2941	1.3333
2.5	1.2500	1.3750	1.3956	1.4286	1.5000

В таблице проведено сравнение относительных значений коэффициента теплопроводности изотропного поликристалла, состоящего из хаотически ориентированных зерен с гексогональной кристаллической решеткой. В таблице обозначено $A = \lambda_{33}/\lambda_{11}$, $\Lambda = \lambda_0/\lambda_{11}$, $\Lambda_+ = \lambda_+/\lambda_{11}$, $\Lambda_+^* = \lambda_+^*/\lambda_{11}$, $\Lambda_-^* = \lambda_-^*/\lambda_{11}$ и $\Lambda_- = \lambda_-/\lambda_{11}$, причем λ_{11} и λ_{33} − коэффициенты теплопроводности кристалла в плоскости основания гексагональной призмы и перпендикулярно этому основанию.

Аналогом (8) для эффективных модулей упругости являются

$$K^* = -4/3\, G_c + \left(\sum_{n=1}^{N} \nu_n P_{iikk}^{(n)}\right)^{-1}, \qquad G^* = -g_c + \left(\sum_{n=1}^{N} \nu_n \left(P_{ikik}^{(n)} - P_{iikk}^{(n)}/3\right)\right)^{-1} \tag{10}$$

где $g_c = (G_c/6)(9K_c + 8G_c)/(K_c + 2G_c)$ G_c, K_c − модули сдвига и всестороннего сжатия для среды сравнения,

$$P^{(n)}_{ijkl} = \left(C^{(n)}_{ijkl} + 4\left[(G_c - g_c/2)\delta_{ij}\delta_{kl}/3 + g_c(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk})\right]\right)^{-1}$$

причем для изотропного компонента с модулями упругости G_n, K_n

$$C_{ijkl} = (K_n - 2G_n/3)\delta_{ij}\delta_{kl} + G_n(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}) \ .$$

При $K_c \to \infty$ и $G_c \to \infty$ или $K_c = G_c = 0$ из (10) следуют известные оценки Фойгта и Рейсса, отвечающие предположениям однородности в материале соответственно деформированного или напряженного состояний,

$$K_+ = \sum_{n=1}^{N} \nu_n K^{(n)}_+ \ge K \ge 1\Big/\sum_{n=1}^{N} \nu_n\Big/K^{(n)}_- = K_-$$
$$G_+ = \sum_{n=1}^{N} \nu_n G^{(n)}_+ \ge G \ge 1\Big/\sum_{n=1}^{N} \nu_n\Big/G^{(n)}_- = G_- \qquad (11)$$

где $K^{(n)}_+ = C^{(n)}_{iikk}/9$, $K^{(n)}_- = \left(S^{(n)}_{iikk}\right)^{-1}$, $G^{(n)}_+ = \left(C^{(n)}_{ikik} - C^{(n)}_{iikk}/3\right)\Big/10$ и $G^{(n)}_- = 5/2\left(S^{(n)}_{ikik} - S^{(n)}_{iikk}/3\right)^{-1}$.

Выбор в (10) значений G_c, и K_c из условия неотрицательности выражений

$$\sum_{n=1}^{N}\int_{V_n} \Delta\varepsilon^{(n)}_{ij}\left((K_c - 2G_c/3)\delta_{ij}\delta_{kl} + G_c(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}) - C^{(n)}_{ijkl}\right)\Delta\varepsilon^{(n)}_{kl}dV \ ,$$

$$\sum_{n=1}^{N}\int_{V_n} \Delta\sigma^{(n)}_{ij}\left((K_c - 2G_c/3)\delta_{ij}\delta_{kl} + 3K_c(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk})\big/2 - 6K_cG_cS^{(n)}_{ijkl}\right)\Delta\sigma^{(n)}_{kl}dV$$

где $\Delta\varepsilon^{(n)}_{ij}$, $\Delta\sigma^{(n)}_{ij}$ – отклонения компонентов тензоров деформации и напряжений в n-ом компоненте неоднородного материала от их средних по объему V_n значений, приводит для модулей упругости K и G к более точным верхним K^*_+, G^*_+ и нижним K^*_-, G^*_- оценкам. Эти оценки следуют из вариационного принципа Хашина-Штрикмана [6] применительно к линейной задаче упругости для неоднородного тела. Их можно улучшить минимизацией энергии взаимодействия компонентов материала путем варьирования средних деформаций и напряжений в компонентах при неизменных деформациях и напряжениях, осредненных по материалу в целом [7]. Для компонентов материала в виде анизотропных включений сферической формы в изотропную среду поля деформации и напряжений в любом включении однородны [2], т.е. $\Delta\varepsilon^{(n)}_{ij}$, $\Delta\sigma^{(n)}_{ij} = 0$. Тогда выбор в (10) $K_c = K^* = K_0$ и $G_c = G^* = G_0$ приводит к самосогласованной модели неоднородного материала [4], которая позволяет построить в изотропной среде и в анизотропных включениях поля деформации и напряжений, допустимые для функционалов в (4) и содержащие неизвестные значения K_0 и G_0, причем $K_+ \ge K^*_+ \ge K_0 \ge K^*_- \ge K_-$ и $G_+ \ge G^*_+ \ge G_0 \ge G^*_- \ge G_-$.

Для теплоемкостей справедливо соотношение $(c_p - c_V)\big/T_0 = \beta_{ij}\alpha_{ij}$ [1]. Аналогичное соотношение в виде $c^*_p - c^*_V = 9K\alpha^2T_0$ верно для эффективных теплоемкостей неоднородного материала. Из (4) при ε_{ij} или σ_{ij} можно соответственно получить двусторонние оценки

$$\overline{c_V} \le c^*_V \le \overline{c_p} - 9K_-\overline{\alpha}^2T_0 \ , \qquad \overline{c_V} + 9\overline{\beta}^2T_0\big/K_+ \le c^*_p \le \overline{c_p} \ .$$

где черта сверху означает осреднение по объему V. Отсюда следует

$$\left(\overline{\beta_{ij}\alpha_{ij}} - 9K_{-}\bar{\alpha}^2\right)T_0 \ge c_V^* - \overline{c_V} \ge 0\ , \qquad \left(\overline{\beta_{ij}\alpha_{ij}} - 9\overline{\beta_{ij}}^2 \big/ K_{+}\right)T_0 \ge \overline{c_p} - c_p^* \ge 0$$

В предположении однородного всестороннего сжатия (или растяжения) из (4) можно получить границы допустимой области эффективных значений K, α и c_p^*. При известном значении K_0 допустимая область значений α и c_p^* ограничена двумя пересекающимися в двух точках параболами [2].

Данная работа является частью проектов, выполняемых при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты NN 94-01-01809 и 94-02-03462).

Литература

1. Шермергор Т.Д. Теория упругости микронеоднородных сред.- М.: Наука, 1977.- 400 с.
2. Кристенсен Р. Введение в механику композитов / Пер. с англ. - М.: Мир, 1982.- 336 с.
3. Победря Б.Е. Механика композиционных материалов.- М.: Изд-во МГУ, 1984.- 336 с.
4. Зарубин В.С. Прикладные задачи термопрочности элементов кон- струкций.- М.: Машиностроение, 1985.- 296 с.
5. Hashin Z., Shtrikman S. Conductivity of polycrystals // Phys. Rev.- 1963.- Vol.I30, N 1.- P.129.
6. Hashin Z., Shtrikman S. A variational approach to the theory of the elastic behavior of multiphase materials // J. Mech. and Phys. Solids.- 1963.- Vol.11, N 2.- P.127.
7. Ефименко А.В., Кувыркин Г.Н. Новые оценки эффективных упру- гих модулей двухкомпонентных композитов // Механика твердого тела.- 1994.- N 1.- C.18-26.