

DOI: 10.18721/JPM.14114
УДК 539.3

СООТНОШЕНИЯ МЕЖДУ МОДУЛЕМ ЮНГА И КОЭФФИЦИЕНТОМ ДИФФУЗИИ ДВУХФАЗНОГО МАТЕРИАЛА

К.П. Фролова

Институт проблем машиноведения РАН,
Санкт-Петербург, Российская Федерация;
Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Российская Федерация

В работе устанавливается взаимосвязь между изменениями эффективных упругих и диффузионных свойств двухфазного композита через микроструктурные параметры. Предполагается, что в материале присутствуют одинаковые по форме неоднородности. Представлен вывод соотношений в явном тензорном виде. При установлении взаимосвязи между эффективными свойствами учитывается эффект сегрегации, заключающийся в скачке концентрации растворенного вещества на границе раздела матрица/неоднородность. Полученные соотношения целесообразно использовать для определения одних эффективных свойств через другие, когда микроструктура материала неизвестна. Установленная взаимосвязь проверена для изотропного материала с порами. Найденные приближенные соотношения сравниваются с точными, полученными для конкретной микроструктуры.

Ключевые слова: эффективный модуль Юнга, эффективный коэффициент диффузии, взаимосвязь между свойствами композита

Ссылка при цитировании: Фролова К.П. Соотношения между модулем Юнга и коэффициентом диффузии двухфазного материала // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2021. Т. 14. № 1. С. 177–189. DOI: 10.18721/JPM.14114

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

CROSS-PROPERTY CONNECTIONS BETWEEN YOUNG'S MODULUS AND DIFFUSION COEFFICIENT OF TWO-PHASE COMPOSITE

K.P. Frolova

Institute for Problems in Mechanical Engineering RAS,
St. Petersburg, Russian Federation;
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University,
St. Petersburg, Russian Federation

The paper interrelates changes in the effective elastic and diffusion properties of a two-phase composite using microstructural parameters. It is suggested that there are some inhomogeneities identical in shape in the material. The development of the cross-property connections in the explicit tensor form has been presented. The segregation effect, being a constant jump in concentration of particles of the solute flux at the matrix/inhomogeneity interface, was taken into account. It is a good practice to apply the derived cross-property relations to finding some effective properties of material using others when the material's microstructure is unknown. The obtained expressions were put to the test for isotropic material with pores; the approximate correlations were compared with exact ones found for the specific microstructure.

Keywords: effective Young's modulus, effective diffusion coefficient, cross-property connection, segregation effect

Citation: Frolova K.P., Cross-property connections between Young's modulus and diffusion coefficient of two-phase composite, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 14 (1) (2021) 177–189. DOI: 10.18721/JPM.14114

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Введение

Нахождение соотношений между различными эффективными свойствами гетерогенных материалов является фундаментальной проблемой механики [1, 2]. Данные математические выражения устанавливают зависимости между изменениями физических свойств, различных по природе, но связанных с одними и теми же особенностями микроструктуры материала. Значимость данной проблемы обусловлена тем, что дает возможность определять одни эффективные свойства через другие при отсутствии полной информации о микроструктуре композита.

Поиск взаимосвязей между изменениями различных свойств обсуждается в литературе, начиная с 1960-х годов. Детальный обзор данной проблемы представлен в монографии [3]; согласно представленной информации, опубликованные исследования можно условно разделить на четыре направления:

- качественные изыскания,
- установление эмпирических зависимостей,
- определение диапазонов изменения характеристик материалов,
- нахождение соотношений для материалов с изолированными неоднородностями в явном виде.

В настоящее время имеется лишь ограниченное количество работ, опубликованных по четвертому направлению.

Взаимосвязь эффективных упругих и проводящих свойств материалов в явном виде была установлена в работах [4, 5]. Полученные авторами выражения можно использовать для описания в общем случае анизотропных материалов с изотропной матрицей; при этом показано, что точность предлагаемых соотношений зависит от формы неоднородностей и разницы в упругих свойствах компонентов среды. В статье [6] получены связующие уравнения между

прочностными характеристиками материала и теплопроводностью металлического композита с чешуйками графита. В статьях [7, 8] получены соотношения между эффективным тепловым расширением и эффективной теплопроводностью, точность которых зависит от формы неоднородностей и разницы в теплопроводности фаз композита. В статьях [9, 10] получены взаимные зависимости между эффективным коэффициентом диффузии и теплопроводностью металл-алмазного композита. В статье [11] в явном виде получены соотношения между тепловыми и электропроводящими свойствами композита.

Процесс диффузии существенно отличается от процесса теплопроводности, рассмотренного в статьях [4, 5], тем, что концентрация, как правило, испытывает скачок на границе раздела двух фаз (матрица – неоднородность), тогда как температура является непрерывной функцией [12]. Явление накопления частиц диффундирующего вещества на границе раздела фаз или внутри включений известно как эффект сегрегации [13].

Данная работа посвящена установлению взаимосвязи между эффективными упругими и диффузионными свойствами двухфазного композита с неоднородностями одинаковой формы; при этом учитывается эффект сегрегации.

Полученные соотношения проверяются для случая изотропного материала с порами; при этом определяется связь между изменениями модуля Юнга и коэффициента диффузии.

Соотношения между эффективными упругими и диффузионными свойствами двухфазного материала

Соотношения между эффективными упругими и проводящими свойствами, полученные в статьях [4, 5], основаны на том,



что изменение этих различных по природе свойств контролируется одними и теми же микроструктурными параметрами. При выводе соотношений использовалось два основных предположения:

неоднородности имеют форму сфероидов; эффективные свойства определяются без учета взаимодействия неоднородностей.

При этом в статьях [4, 5] показано, что полученные соотношения выполняются (в том числе) для материалов с неоднородностями, форма которых отлична от сфероидальной, и при больших концентрациях, чем допускает метод гомогенизации без учета взаимодействия неоднородностей. Это объясняется тем, что форма и концентрация неоднородностей влияют на упругие и проводящие свойства в одинаковой степени.

Основываясь на аналогии между уравнениями диффузии и теплопроводности, воспользуемся для определения связи между эффективными упругими и диффузионными свойствами методикой, изложенной в работах [4, 5]. Согласно данной методике, в рассмотрение вводятся тензоры вклада в искомые свойства, которые выступают как основные микроструктурные параметры [3].

При определении эффективных упругих свойств вводится тензор вклада неоднородности в податливость – тензор 4-го ранга \mathbf{H} , описывающий дополнительную деформацию, возникающую в представительном объеме ввиду присутствия изолированной неоднородности. Указанный тензор зависит от формы неоднородности и разности упругих свойств матрицы и неоднородности. В случае сфероидального включения тензор 4-го ранга \mathbf{H} является трансверсально-изотропным (ось симметрии совпадает с осью симметрии сфероиды) и может быть представлен как линейная комбинация элементов тензорного базиса $\mathbf{T}_1, \mathbf{T}_2, \dots, \mathbf{T}_6$:

$$\mathbf{H} = \sum_{k=1}^6 h_k \mathbf{T}_k, \quad (1)$$

где

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_1 &= \boldsymbol{\theta}\boldsymbol{\theta}, \\ \mathbf{T}_2 &= \frac{1}{2} \left((\boldsymbol{\theta}\boldsymbol{\theta})_{(1,4)}^T + (\boldsymbol{\theta}\boldsymbol{\theta})_{(2,4)}^T - \boldsymbol{\theta}\boldsymbol{\theta} \right), \\ \mathbf{T}_3 &= \boldsymbol{\theta}\mathbf{nn}, \quad \mathbf{T}_4 = \mathbf{nn}\boldsymbol{\theta}, \\ \mathbf{T}_5 &= \frac{1}{4} \left(\mathbf{n}\boldsymbol{\theta}\mathbf{n} + (\mathbf{n}\boldsymbol{\theta}\mathbf{n})_{(1,2)(3,4)}^T + \right. \\ &\quad \left. + (\boldsymbol{\theta}\mathbf{nn})_{(1,4)}^T + (\boldsymbol{\theta}\mathbf{nn})_{(2,3)}^T \right), \\ \mathbf{T}_6 &= \mathbf{nnnn}, \end{aligned}$$

($\boldsymbol{\theta}$ – проектор на плоскость, ортогональную орту оси симметрии сфероидальной неоднородности \mathbf{n} ; $\boldsymbol{\theta} = \mathbf{I} - \mathbf{nn}$ (\mathbf{I} – единичный тензор 2-го ранга)).

Эффективный тензор податливости можно определить в рамках метода гомогенизации без учета взаимодействия неоднородностей следующим образом:

$$\mathbf{S}^{eff} = \mathbf{S}^0 + \frac{1}{V} \sum_k V_k \mathbf{H}_k, \quad (2)$$

где \mathbf{S}^0 – тензор податливости матрицы, V – представительный объем, V_k – объем k -ой неоднородности.

При определении эффективных упругих свойств материала с одинаковыми по форме неоднородностями, выражение (2) можно переписать в виде

$$\begin{aligned} \mathbf{S}^{eff} &= \mathbf{S}^0 + \rho(W_1 \boldsymbol{\Pi} + W_2 \mathbf{J}) + \\ &+ W_3 (\mathbf{I}\boldsymbol{\omega} + \boldsymbol{\omega}\mathbf{I}) + W_4 (\mathbf{J} \cdot \boldsymbol{\omega} + \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{J}) + \\ &+ W_5 \boldsymbol{\Omega}, \end{aligned} \quad (3)$$

где

$$\mathbf{J} = \frac{1}{2} \left((\boldsymbol{\Pi})_{(1,4)}^T + (\boldsymbol{\Pi})_{(2,4)}^T \right)$$

– единичный тензор 4-го ранга; параметры $W_i (i = 1, 2, \dots, 5)$ выражаются через входящие в выражение (1) коэффициенты h_i как

$$\begin{aligned} W_1 &= h_1 - h_2/2, \quad W_2 = h_2, \\ W_3 &= -2h_1 + h_2 + 2h_3, \end{aligned}$$

$$W_4 = -2h_2 + h_5,$$

$$W_5 = h_1 + \frac{h_2}{2} - 2h_3 - h_5 + h_6,$$

а

$$\Omega = \frac{1}{V} \sum_k V_k (\mathbf{n}\mathbf{n}\mathbf{n}\mathbf{n})^{(k)},$$

$$\omega = \frac{1}{V} \sum_k V_k (\mathbf{n}\mathbf{n})^{(k)}, \quad (4)$$

$$\rho = \text{tr}\omega = \frac{1}{V} \sum_k V_k,$$

ρ – объемная доля неоднородностей.

Аналогичным образом определяются эффективные диффузионные свойства материала, состоящего из матрицы с шаровым тензором диффузии $\mathbf{D}_0 = D_0 \mathbf{I}$ и неоднородностей с $\mathbf{D}_1 = D_1 \mathbf{I}$ [14]. В рассмотрение вводится либо тензор вклада неоднородности в диффузию – \mathbf{H}^D (тензор 2-го ранга), определяющий дополнительный массовый поток, вызванный присутствием в материале неоднородности, либо тензор вклада в сопротивляемость \mathbf{H}^{DR} (тензор 2-го ранга), $\mathbf{H}^{DR} = -\mathbf{H}^D / D_0^2$.

Предполагается, что и матрица, и неоднородность подчиняются линейному закону Фика. При этом считается, что нормальная компонента потока диффундирующего вещества непрерывна при переходе через границу матрицы (со знаком плюс) и неоднородности (со знаком минус), а концентрация испытывает скачок

$$c(x) \Big|_{x \rightarrow \partial V^+} = sc(x) \Big|_{x \rightarrow \partial V^-}, \quad (5)$$

где s – параметр сегрегации.

Наличие эффекта сегрегации приводит к принципиальному отличию процесса диффузии от процесса теплопроводности, рассмотренного в статьях [4, 5]. Параметр сегрегации показывает соотношение концентраций на границе неоднородности и внутри нее и равен единице в случае непрерывной функции концентрации при переходе через границу раздела матрица/неоднородность. Случай $s > 1$ соответствует материалу, в ко-

тором частицы диффундирующего вещества скапливаются на границе раздела двух фаз, тогда как случай $s < 1$ соответствует оседанию частиц внутри неоднородностей [14]. При исследовании матрицы с порами, только случай $s \leq 1$ представляет интерес с физической точки зрения.

В случае сфероидальной неоднородности тензоры вклада определяются следующим образом:

$$\mathbf{H}^D = D_0 [B_1 (\mathbf{I} - \mathbf{n}\mathbf{n}) + B_2 \mathbf{n}\mathbf{n}],$$

$$\mathbf{H}^{DR} = -\frac{1}{D_0} [B_1 (\mathbf{I} - \mathbf{n}\mathbf{n}) + B_2 \mathbf{n}\mathbf{n}], \quad (6)$$

при этом коэффициенты B_1 и B_2 зависят от формы неоднородности, разницы в коэффициентах диффузии матрицы и неоднородности, а также от параметра сегрегации.

Эффективный тензор диффузии вводится в рамках метода гомогенизации без учета взаимодействия неоднородностей как

$$\mathbf{D}^{eff} = D_0 \mathbf{I} + \frac{1}{V} \sum_k V_k \mathbf{H}_k^D, \quad (7)$$

а эффективный тензор сопротивляемости имеет вид

$$(\mathbf{D}^{eff})^{-1} = \frac{1}{D_0} \mathbf{I} + \frac{1}{V} \sum_k V_k \mathbf{H}_k^{DR}. \quad (8)$$

Эффективные диффузионные свойства материала с одинаковыми по форме неоднородностями можно выразить через объемную долю неоднородностей ρ и тензор второго ранга ω , определяемые выражениями (4), следующим образом:

$$\frac{1}{D_0} \mathbf{D}^{eff} - \mathbf{I} = \mathbf{I} - D_0 (\mathbf{D}^{eff})^{-1} =$$

$$= B_1 \rho \mathbf{I} + (B_2 - B_1) \omega. \quad (9)$$

Установление явной взаимосвязи между эффективными упругими и диффузионными свойствами возможно, если они выражаются через одни и те же микроструктурные параметры, т. е. скалярный параметр ρ и тензор-



ный параметр ω . Таким образом, для получения соотношений между эффективными свойствами, в выражении для эффективного тензора податливости (3) необходимо избавиться от слагаемого, содержащего тензор 4-го ранга Ω . Согласно утверждениям в статьях [4, 5], это возможно за счет корректировки коэффициентов W_1, W_2, W_3, W_4 :

$$\mathbf{S}^{eff} = \mathbf{S}^0 + \frac{1}{E_0} \left[\rho (s_1 \mathbf{I} \cdot \mathbf{I} + s_2 \mathbf{J}) + \frac{s_3}{2} (\mathbf{I} \cdot \omega + \omega \cdot \mathbf{I}) + \frac{s_4}{2} (\mathbf{J} \cdot \omega + \omega \cdot \mathbf{J}) \right], \quad (10)$$

где E_0 – модуль Юнга матрицы, коэффициенты s_i ($i = 1, 2, 3, 4$) определяются как

$$\begin{aligned} s_1 &= E_0 (\hat{h}_1 - \hat{h}_2 / 2), \\ s_2 &= E_0 \hat{h}_2, \\ s_3 &= E_0 (-2\hat{h}_1 + \hat{h}_2 + 2\hat{h}_3), \\ s_4 &= E_0 (-2\hat{h}_2 + \hat{h}_5), \end{aligned}$$

а коэффициенты \hat{h}_i ($i = 1, 2, \dots, 5$) выражаются через h_i следующим образом:

$$\begin{aligned} \hat{h}_i &= h_i (1 - \delta \operatorname{sign} h_i) \\ &\text{при } i = 1, 2, 6; \\ \hat{h}_i &= h_i (1 + \delta \operatorname{sign} h_i) \\ &\text{при } i = 3, 5; \\ \delta &= \\ &= \frac{h_1 + h_2 / 2 - 2h_3 - h_5 + h_6}{|h_1| + |h_2| / 2 + 2|h_3| + |h_5| + |h_6|}. \end{aligned}$$

Для вывода соотношений между эффективными упругими и диффузионными свойствами материала для общего случая распределения неоднородностей по ориентациям, выразим тензор ω и параметр ρ через тензоры \mathbf{D}^{eff} и $(\mathbf{D}^{eff})^{-1}$, соответственно:

$$\begin{aligned} \omega &= \\ &= \frac{1}{(B_2 - B_1)} \left(\frac{1}{D_0} \mathbf{D}^{eff} - \mathbf{I} \right) - \\ &\quad - \frac{B_1}{(B_2 - B_1)} \rho \mathbf{I}, \\ \rho &= \frac{\operatorname{tr} \mathbf{D}^{eff} - 3D_0}{D_0 (2B_1 + B_2)}; \end{aligned} \quad (11)$$

$$\begin{aligned} \omega &= \\ &= \frac{1}{(B_2 - B_1)} \left(\mathbf{I} - D_0 (\mathbf{D}^{eff})^{-1} \right) - \\ &\quad - \frac{B_1}{(B_2 - B_1)} \rho \mathbf{I}, \\ \rho &= \frac{3 - D_0 \operatorname{tr} (\mathbf{D}^{eff})^{-1}}{2B_1 + B_2}. \end{aligned} \quad (12)$$

В результате подстановки этих выражений в равенство (10) можно получить два соотношения, устанавливающих явную взаимосвязь между эффективной податливостью и эффективными диффузионными свойствами:

$$\begin{aligned} E_0 (\mathbf{S}^{eff} - \mathbf{S}^0) &= \\ &= (\alpha_1 \mathbf{I} \cdot \mathbf{I} + \alpha_2 \mathbf{J}) \times \\ &\quad \times (\operatorname{tr} \mathbf{D}^{eff} / D_0 - 3) + \\ &\quad + \alpha_3 \left[(\mathbf{D}^{eff} / D_0 - \mathbf{I}) \mathbf{I} + \right. \\ &\quad \left. + \mathbf{I} (\mathbf{D}^{eff} / D_0 - \mathbf{I}) \right] + \\ &\quad + \alpha_4 \left[(\mathbf{D}^{eff} / D_0 - \mathbf{I}) \cdot \mathbf{J} + \right. \\ &\quad \left. + \mathbf{J} (\mathbf{D}^{eff} / D_0 - \mathbf{I}) \right] \end{aligned} \quad (13)$$

при использовании соотношений (11) и

$$\begin{aligned} E_0 (\mathbf{S}^{eff} - \mathbf{S}^0) &= \\ &= (\alpha_1 \mathbf{I} \cdot \mathbf{I} + \alpha_2 \mathbf{J}) \times \\ &\quad \times \left(3 - D_0 \operatorname{tr} (\mathbf{D}^{eff})^{-1} \right) + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & +\alpha_3 \left[\left(\mathbf{I} - D_0 (\mathbf{D}^{eff})^{-1} \right) \mathbf{I} + \right. \\
 & \left. + \mathbf{I} \left(\mathbf{I} - D_0 (\mathbf{D}^{eff})^{-1} \right) \right] + \\
 & +\alpha_4 \left[\left(\mathbf{I} - D_0 (\mathbf{D}^{eff})^{-1} \right) \cdot \mathbf{J} + \right. \\
 & \left. + \mathbf{J} \left(\mathbf{I} - D_0 (\mathbf{D}^{eff})^{-1} \right) \right]
 \end{aligned} \quad (14) \quad (13) \text{ и}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{E^{eff}}{E_0} = & \left[1 + (3\alpha_1 + 3\alpha_2 + \right. \\
 & \left. + 2\alpha_3 + 2\alpha_4) \left(1 - \frac{D_0}{D^{eff}} \right) \right]^{-1}
 \end{aligned} \quad (16)$$

при использовании соотношений (12);
здесь

$$\begin{aligned}
 \alpha_1 &= \frac{s_1 (B_2 - B_1) - s_3 B_1}{(B_2 - B_1)(2B_1 + B_2)}, \\
 \alpha_2 &= \frac{s_2 (B_2 - B_1) - s_4 B_1}{(B_2 - B_1)(2B_1 + B_2)}, \\
 \alpha_3 &= \frac{s_3}{2(B_2 - B_1)}, \\
 \alpha_4 &= \frac{s_4}{2(B_2 - B_1)}.
 \end{aligned}$$

Соотношения между эффективным модулем Юнга и эффективным коэффициентом диффузии материала с порами

Для определения взаимосвязи между эффективными упругими модулями и эффективными коэффициентами диффузии необходимо использовать компонентное представление выражений (13) и (14). В случае изотропного материала будут иметь место следующие соотношения:

$$\begin{aligned}
 \frac{E^{eff}}{E_0} = & \left[1 + (3\alpha_1 + 3\alpha_2 + \right. \\
 & \left. + 2\alpha_3 + 2\alpha_4) \left(\frac{D^{eff}}{D_0} - 1 \right) \right]^{-1}
 \end{aligned} \quad (15)$$

при использовании тензорного выражения

при использовании тензорного выражения (14).

Соотношения (15) и (16) выражают зависимость одного эффективного модуля от другого на макроуровне. Необходимая информация о микроструктуре сводится к определению формы отдельной неоднородности, поскольку от нее зависят коэффициенты α_i . В общем случае соотношения (15) и (16) являются приближенными, поскольку они получены с использованием приближенного выражения для эффективного тензора податливости (10).

Изотропному материалу, содержащему неоднородности, соответствуют два случая: они имеют сферическую форму, они распределены по ориентациям произвольным образом.

Соотношения (15) и (16) являются точными в первом случае, поскольку $\delta = 0$ и, следовательно, приближенное выражение для эффективного тензора податливости (10) совпадает с точным. Во втором случае $\delta \neq 0$ и выражения (15), (16) являются приближенными.

Исследуем два этих случая и оценим точность полученных приближенных соотношений.

Определим по формулам (15), (16) связь между эффективным модулем Юнга и эффективным коэффициентом диффузии материала со сферическими порами и сравним полученное выражение с прямо вычисляемым.

В случае матрицы с порами коэффициенты тензора вклада неоднородности в податливость h_i имеют вид

$$\begin{aligned} h_1 &= \frac{q_6}{2\Delta}, h_2 = \frac{1}{q_2}, h_3 = -\frac{q_3}{\Delta}, \\ h_4 &= -\frac{q_4}{\Delta}, h_5 = \frac{4}{q_5}, h_6 = \frac{2q_1}{\Delta}, \end{aligned} \quad (17)$$

где $\Delta = 2(q_1 q_6 - q_3 q_4)$ и

$$\begin{aligned} q_1 &= \mu [4\kappa - 1 - 2(3\kappa - 1)f_0 - 2\kappa f_1], \\ q_2 &= 2\mu [1 - (2 - \kappa)f_0 - \kappa f_1], \\ q_3 &= q_4 = 2\mu [(2\kappa - 1)f_0 + 2\kappa f_1], \\ q_5 &= 4\mu [f_0 + 4\kappa f_1], \\ q_6 &= 8\mu \kappa [f_0 - f_1], \\ \kappa &= (1 - \nu)/2; \end{aligned}$$

μ – модуль сдвига матрицы; ν – коэффициент Пуассона матрицы; f_0, f_1 – функции, зависящие от формы сфероидальной неоднородности, т. е. от отношения длин полуосей сфероида $\gamma = a_3/a$ (a_3 – полуось вращения) как

$$\begin{aligned} f_0 &= \frac{1 - g}{2(1 - \gamma^{-2})}, \\ f_1 &= \frac{1}{4(1 - \gamma^{-2})^2} [(2 + \gamma^{-2})g - 3\gamma^{-2}], \end{aligned}$$

где

$$g = \begin{cases} \frac{1}{\gamma\sqrt{1-\gamma^2}} \arctan \frac{\sqrt{1-\gamma^2}}{\gamma}, & \gamma \leq 1 \\ \frac{1}{2\gamma\sqrt{\gamma^2-1}} \ln \left(\frac{\gamma + \sqrt{\gamma^2-1}}{\gamma - \sqrt{\gamma^2-1}} \right), & \gamma \geq 1. \end{cases}$$

Коэффициенты тензора вклада в диффузию имеют вид

$$B_1 = \frac{1 - \lambda}{s\lambda + (1 - s\lambda)f_0}, \quad (18)$$

$$B_2 = \frac{1 - \lambda}{1 - 2(1 - s\lambda)f_0}, \quad (18)$$

где $\lambda = D_0/D_1$.

Тогда выражения (15) и (16) сведутся соответственно к равенствам

$$\begin{aligned} \frac{E^{eff}}{E_0} &= \left[1 + \frac{(1 - \nu)(9 + 5\nu)}{2(7 - 5\nu)} \times \right. \\ &\quad \left. \times \frac{1 + 2s\lambda \left(\frac{D}{D_0} - 1 \right)}{1 - \lambda} \right]^{-1}, \\ \frac{E^{eff}}{E_0} &= \left[1 + \frac{(1 - \nu)(9 + 5\nu)}{2(7 - 5\nu)} \times \right. \\ &\quad \left. \times \frac{1 + 2s\lambda \left(1 - \frac{D_0}{D} \right)}{1 - \lambda} \right]^{-1}. \end{aligned} \quad (19)$$

Чтобы получить прямую взаимосвязь между эффективными модулями, выразим объемную долю неоднородностей непосредственно через эффективный коэффициент диффузии, определяемый с помощью метода гомогенизации без учета взаимодействия пор, и подставим в точное выражение для эффективного тензора податливости, определяемого также без учета взаимодействия.

Так, тензоры вклада сферической неоднородности в диффузию и в сопротивляемость определяются выражениями

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_p^D &= \frac{3(1 - \lambda)}{2s\lambda + 1} D_0 \mathbf{I}, \\ \mathbf{H}_p^{DR} &= -\frac{3(1 - \lambda)}{(2s\lambda + 1)D_0} \mathbf{I}. \end{aligned} \quad (20)$$

Подстановка первого и второго выражений (20) соответственно в уравнение для эффективного тензора диффузии (7) и эффективного тензора сопротивляемости (8) позволит выразить объемную долю неоднородностей через эффективные диффузионные свойства.

Последующая подстановка полученного выражения для ρ в уравнение для эффективного тензора податливости (2), с учетом формулы для изотропного тензора вклада сферической поры в податливость, т. е.

$$\mathbf{H}_p = \frac{15(1-\nu)}{2\mu} \left[\frac{1}{10(1+\nu)} \frac{1}{3} \mathbf{I} \cdot \mathbf{I} + \frac{1}{7-5\nu} \left(\mathbf{J} - \frac{1}{3} \mathbf{I} \cdot \mathbf{I} \right) \right], \quad (21)$$

приведет к результату, в точности совпадающему с выражениями (19).

Таким образом, выполнена проверка полученных приближенных соотношений для случая микроструктуры, при которой они являются точными.

Во втором случае, соответствующем изотропному материалу (при произвольном распределении неоднородностей по ориентациям), соотношения (15) и (16) являются приближенными. При этом точную взаимосвязь между эффективными упругими и диффузионными свойствами можно установить для случая произвольного распределения сфероидов по ориентациям независимо, по аналогии с тем, как это делалось выше для случая сферических неоднородностей.

Для количественной и качественной оценок полученных нами приближенных соотношений, сравним их с точными, определенными для конкретной микроструктуры.

Для установления точных соотношений определим объемную долю неоднородностей через эффективный коэффициент диффузии изотропного материала и затем подставим полученное выражение в уравнение для определения эффективного модуля Юнга. Адекватность такого подхода обусловлена изотропией эффективных тензоров, в результате которой единственным общим микроструктурным параметром, определяющим эффективные свойства материала, является скалярный параметр ρ . При использовании метода гомогенизации без учета взаимодействия в терминах тензоров вклада в диффузию, получается следующее выражение, свя-

зывающее эффективный модуль Юнга с эффективным коэффициентом диффузии:

$$\frac{E^{eff}}{E_0} = \left[1 + \frac{E_0 h_\Sigma}{15\eta} \left(\frac{D^{eff}}{D_0} - 1 \right) \right]^{-1}, \quad (22)$$

а при использовании этого же метода в терминах тензоров вклада в диффузию выражение имеет вид:

$$\frac{E^{eff}}{E_0} = \left[1 + \frac{E_0 h_\Sigma}{15\eta} \left(1 - \frac{D_0}{D^{eff}} \right) \right]^{-1}, \quad (23)$$

где $h_\Sigma = 8h_1 + 4h_2 + 4h_3 + 2h_5 + 3h_6$,
 $\eta = 2B_1/3 + B_2/3$.

Сравнение результатов, полученных с помощью приближенных соотношений (15), (16), с результатами, полученными на основании точных соотношений (22) и (23) соответственно, представлены на рис. 1 для случая $\lambda = 0$, что соответствует $D_1 \rightarrow \infty$ (в этом случае параметр сегрегации, как следует из соотношения (18), не играет роли), $E_0 = 208$ ГПа.

Видно, что соотношения (15) и (16) достаточно точно описывают связь между эффективными свойствами на макроуровне. При этом эффективные значения, полученные через тензоры вклада в сопротивляемость диффузии (рис. 1, *a*) и через тензоры вклада в диффузию (рис. 1, *b*), различаются. Это связано с тем, что соотношения получены без учета взаимовлияния неоднородностей.

Для получения точных соотношений с учетом взаимовлияния неоднородностей обратимся к методу гомогенизации Максвелла [3]. Результат, полученный с помощью этого метода через тензоры вклада в диффузию, совпадает с результатом, полученным через тензоры вклада в сопротивляемость и, таким образом, результат однозначен, в отличие от метода гомогенизации без учета взаимодействия.

Модуль Юнга материала со сфероидальными порами определялся нами в статье [15], а эффективный коэффициент диффузии такого материала – в статье [16]. Для получения точных соотношений необходимо

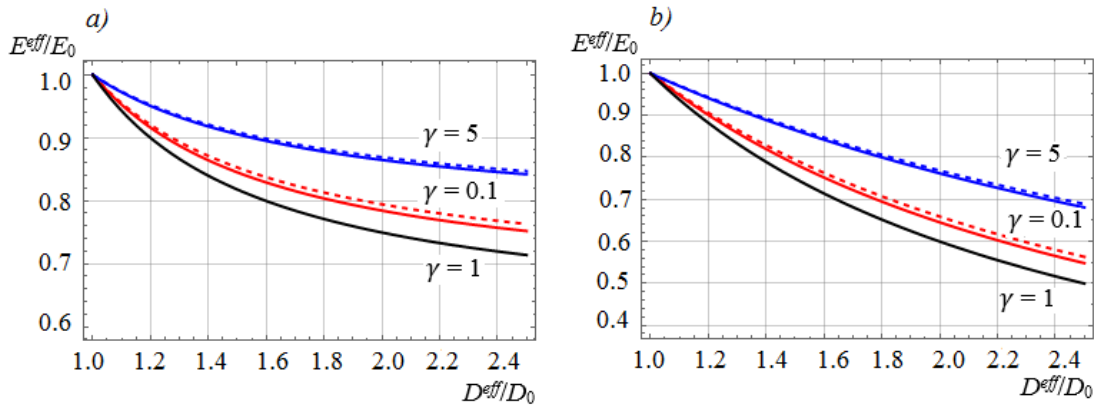


Рис. 1. Зависимости относительного эффективного модуля Юнга от относительного эффективного коэффициента диффузии при использовании соотношений податливость-сопротивляемость диффузии (а) и податливость-диффузия (б) для различных значений отношения длин полуосей сфероида γ . Сравниваются приближенные соотношения (сплошные линии) с точными (пунктиры)

подставить выражение для объемной доли включений

$$\rho = 3 \frac{D^{eff} - D_0}{(D^{eff} + 2D_0)\eta}$$

в выражение для эффективного модуля Юнга.

Сравнение установленных в данной работе приближенных соотношений с точными соотношениями, полученными в рамках схемы Максвелла, представлено на рис. 2 для случая $\lambda = 0$, $E_0 = 208$ ГПа.

Анализ графиков на рис. 2 позволяет заключить, что предпочтительнее использовать соотношения, построенные с помощью тензоров вклада в диффузию, поскольку они лучше совпадают с точным соотношением, построенным с использованием схемы Максвелла.

Исследуя влияние сегрегации на взаимосвязь между эффективными свойствами материала, учтем, что коэффициент диффузии пор намного больше коэффициента диффузии матрицы ($D_1 \gg D_0$), но при этом не бесконечен; такое предположение соответствует реальному материалу. Примем для определенности, что $\lambda = 0,01$, $E_0 = 208$ ГПа. Зависимость от параметра сегрегации неявно присутствует в выражениях (15), (16) только в коэффициенте η , поскольку

$$\begin{aligned} 3\alpha_1 + 3\alpha_2 + 2\alpha_3 + 2\alpha_4 &= \\ &= \frac{3(s_1 + s_2) + s_3 + s_4}{3\eta}; \end{aligned}$$

этот же коэффициент можно выделить и в самом выражении для эффективного тензора диффузии.

Зависимость коэффициента η от параметра сегрегации при разных значениях отношения длин полуосей сфероида показана на рис. 3.

Видно, что сегрегация не оказывает заметного эффекта при наличии сферических пор. В случае сплюснутых и вытянутых сфероидальных пор влияние сегрегации более выражено, что сказывается и на эффективных коэффициентах диффузии [14, 16]. При этом, согласно зависимостям, изображенным на рис. 4, сегрегация не оказывает заметного влияния непосредственно на связь между эффективными свойствами (графики построены для соотношений, основанных на связи податливость-диффузия). Таким образом, еще одним преимуществом использования установленной взаимосвязи между эффективными свойствами в явном виде является ее независимость от того, оседают частицы диффундирующего вещества в порах или нет — достаточно информации об

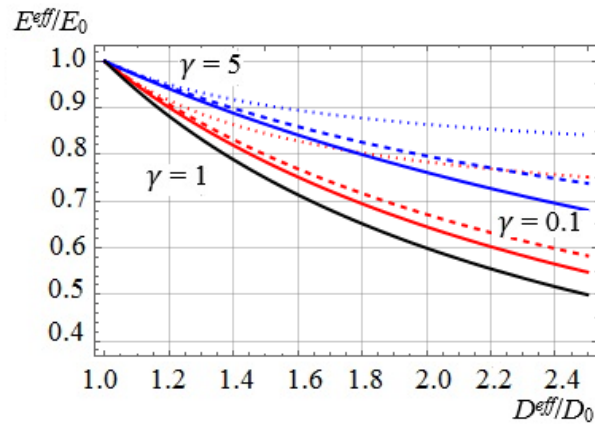


Рис. 2. Сравнение приближенных соотношений податливость-диффузия (сплошные линии) и податливость-сопротивляемость (точечные линии) с точными, полученными в рамках схемы Максвелла (пунктирные линии)

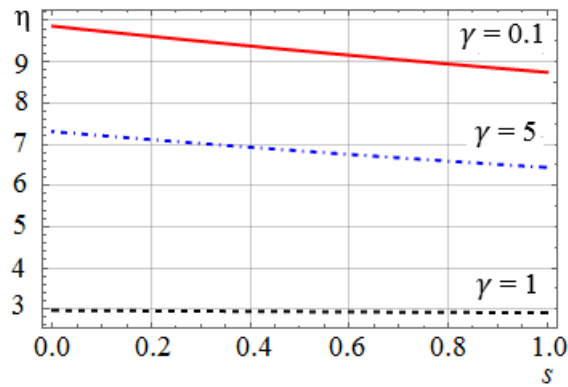


Рис. 3. Зависимость коэффициента η от параметра сегрегации при разных значениях отношения длин полуосей сфероида γ

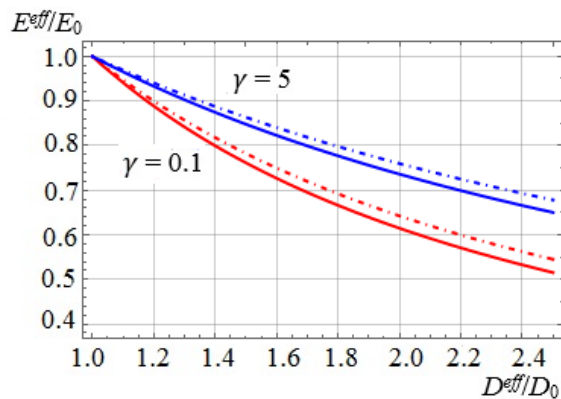


Рис. 4. Зависимости относительного эффективного модуля Юнга от относительного эффективного коэффициента диффузии при двух значениях отношения длин полуосей сфероида γ и параметра сегрегации s : 1,00 (сплошная линия) и 0,01 (штрихпунктир)



эффективных свойствах материала (упругих или диффузионных).

Заключение

В работе в явном виде получены соотношения, устанавливающие связь между эффективными упругими и диффузионными свойствами материала. Полученные зависимости целесообразно использовать для определения изменений одних свойств через другие, когда неизвестна микроструктура материала.

При выводе соотношений использовалась известная (из литературы) методика, изложенная в терминах тензоров вклада для определения взаимосвязи между эффективными упругими и теплопроводящими свойствами. В полученных в настоящей статье зависимостях учтен эффект сегрегации, принципиально отличающий процесс диффузии от процесса теплопроводности.

Подробно исследован случай изотропного материала с порами, в которых может оседать диффундирующее вещество. Показано, что для этого случая установленные соотношения достаточно точно описывают

зависимость эффективного упругого модуля Юнга от эффективного коэффициента диффузии.

На основании сравнения указанных результатов с полученными в рамках метода Максвелла, который учитывает взаимовлияние множественных неоднородностей, сделан вывод о предпочтительном применении выражений, связывающих податливость материала с диффузионной проводимостью, а не с сопротивляемостью.

Проанализировано влияние сегрегации на взаимосвязь между эффективными свойствами материала. Показано, что учет сегрегации через задание соответствующего параметра не оказывает в данном случае заметного влияния, что доказывает преимущество использования полученных соотношений при определении одних свойств через другие на макроуровне, поскольку отпадает необходимость эмпирического определения величины параметра сегрегации.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 20-08-01100).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Berryman J.G., Milton G.W.** Microgeometry of random composites and porous media // *Journal of Physics D: Applied Physics*. 1988. Vol. 21. No. 1. Pp. 87–94.
2. **Gibiansky L.V., Torquato S.** Connection between the conductivity and bulk modulus of isotropic composite materials // *Proceedings of the Royal Society of London. Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. 1996. Vol. 452. No. 1945. Pp. 253–283.
3. **Kachanov M., Sevostianov I.** *Micromechanics of materials, with applications*. Berlin, Germany: Springer, 2018. Vol. 249. 712 p.
4. **Sevostianov I., Kachanov M.** Explicit cross-property correlations for anisotropic two-phase composite materials // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 2002. Vol. 50. No. 2. Pp. 253–282.
5. **Sevostianov I., Kachanov M.** Connections between elastic and conductive properties of heterogeneous materials // *Advances in Applied Mechanics*. Vol. 42. Edited by H. Aref, E. van der Giessen. USA: Elsevir, 2009. Pp. 69–252.
6. **Mazloun A., Oddone V., Reich S., Sevostianov I.** Connection between strength and thermal conductivity of metal matrix composites with uniform distribution of graphite flakes // *International Journal of Engineering Science*. 2019. Vol. 139. June. Pp. 70–82.
7. **Sevostianov I.** On the thermal expansion of composite materials and cross-property connection between thermal expansion and thermal conductivity // *Mechanics of Materials*. 2012. Vol. 45. February. Pp. 20–33.
8. **Mazloun A., Sevostianov I.** Connections between anisotropic tensors of thermal conductivity and thermal expansion coefficients // *International Journal of Engineering Science*. 2018. Vol. 122. January. Pp. 1–13.
9. **Anisimova M.A., Knyazeva A.G., Sevostianov I.**

nov I. Connection between diffusion coefficient and thermal conductivity of a metal matrix composite // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. 2017. Vol. 175. No. 1. P. 012051.

10. Anisimova M., Knyazeva A., Sevostianov I. Effective thermal properties of an aluminum matrix composite with coated diamond inhomogeneities // International Journal of Engineering Science. 2016. Vol. 106. September. Pp. 142–154.

11. Mazloum A., Kováčik J., Emmer Š., Sevostianov I. Copper-graphite composites: Thermal expansion, thermal and electrical conductivities, and cross-property connections // Journal of Materials Science. 2016. Vol. 51. No. 17. Pp. 7977–7990.

12. Zhang Y., Liping L. On diffusion in heterogeneous media // American Journal of Science. 2012. Vol. 312. No. 9. Pp. 1028–1047.

13. Kaur I., Mishin Y., Gust W. Fundamentals of grain and interphase boundary diffusion. 3rd re-

vised and enlarged edition. John Wiley & Sons. Inc., 1995. 528 p.

14. Knyazeva A.G., Grabovetskaya G.P., Mishin I.P., Sevostianov I. On the micromechanical modelling of the effective diffusion coefficient of a polycrystalline material // Philosophical Magazine. 2015. Vol. 95. No. 19. Pp. 2046–2066.

15. Фролова К.П. Определение эффективного модуля Юнга среды с микроструктурой, характерной для водородной дегградации // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2020. Т. 13. № 2. С. 160–174.

16. Frolova K.P., Vilchevskaya E.N. Effective diffusion coefficient of a porous material applied to the problem of hydrogen damage (Chapter 7) // Polyanskiy V.A., Belyaev A.K. (Eds.). Advances in Hydrogen Embrittlement Study. Springer, Cham., 2021. Advanced Structured Materials. Vol. 143. Pp. 113–130.

Статья поступила в редакцию 19.01.2021, принята к публикации 01.02.2021.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

ФРОЛОВА Ксения Петровна – младший научный сотрудник Института проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, Российская Федерация; ассистент Высшей школы теоретической механики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

199178, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Большой проспект В.О., 61
kspfrolova@gmail.com

REFERENCES

1. Berryman J.G., Milton G.W., Microgeometry of random composites and porous media, Journal of Physics D: Applied Physics. 21(1) (1988) 87–94.

2. Gibiansky L.V., Torquato S., Connection between the conductivity and bulk modulus of isotropic composite materials, Proceedings of the Royal Society of London. Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences. 452 (1945) (1996) 253–283.

3. Kachanov M., Sevostianov I., Micromechanics of materials, with applications, Vol. 249, Springer, Berlin, Germany, 2018.

4. Sevostianov I., Kachanov M., Explicit cross-property correlations for anisotropic two-phase composite materials, Journal of the Mechanics and Physics of Solids. 50 (2) (2002) 253–282.

5. Sevostianov I., Kachanov M., Connections between elastic and conductive properties of heterogeneous materials, In the book: Advances in Applied Mechanics, Edited by H. Aref, E. van der Giessen, Elsevir, USA. 42 (2009) 69–252.

6. Mazloum A., Oddone V., Reich S., Sevostianov I., Connection between strength and thermal conductivity of metal matrix composites



- with uniform distribution of graphite flakes, *International Journal of Engineering Science*. 139 (June) (2019) 70–82.
7. **Sevostianov I.**, On the thermal expansion of composite materials and cross-property connection between thermal expansion and thermal conductivity, *Mechanics of Materials*. 45 (February) (2012) 20–33.
8. **Mazloum A., Sevostianov I.**, Connections between anisotropic tensors of thermal conductivity and thermal expansion coefficients, *International Journal of Engineering Science*. 122 (January) (2018) 1–13.
9. **Anisimova M.A., Knyazeva A.G., Sevostianov I.**, Connection between diffusion coefficient and thermal conductivity of a metal matrix composite, *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*. 175 (1) (2017) 012051.
10. **Anisimova M., Knyazeva A., Sevostianov I.**, Effective thermal properties of an aluminum matrix composite with coated diamond inhomogeneities, *International Journal of Engineering Science*. 106 (September) (2016) 142–154.
11. **Mazloum A., Kováčik J., Emmer Š., Sevostianov I.**, Copper-graphite composites: Thermal expansion, thermal and electrical conductivities, and cross-property connections, *Journal of Materials Science*. 51 (17) (2016) 7977–7990.
12. **Zhang Y., Liping L.**, On diffusion in heterogeneous media, *American Journal of Science*. 312 (9) (2012) 1028–1047.
13. **Kaur I., Mishin Y., Gust W.**, *Fundamentals of grain and interphase boundary diffusion*, 3rd revised and enlarged edition, John Wiley & Sons. Inc., 1995.
14. **Knyazeva A.G., Grabovetskaya G.P., Mishin I.P., Sevostianov I.**, On the micromechanical modelling of the effective diffusion coefficient of a polycrystalline material, *Philosophical Magazine*. 95 (19) (2015) 2046–2066.
15. **Frolova K.P.**, Determination of the effective Young's modulus of medium with microstructure typical for hydrogen degradation, *St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics*. 13 (2) (2020) 160–174.
16. **Frolova K.P., Vilchevskaya E.N.**, Effective diffusion coefficient of a porous material applied to the problem of hydrogen damage, Ch. 7, In the book: Polyansky V.A., Belyaev A.K. (Eds.). *Advances in Hydrogen Embrittlement Study*, Springer, Cham., 2021, *Advanced Structured Materials*, Vol. 143, Pp. 113–130.

Received 19.01.2021, accepted 01.02.2021.

THE AUTHOR

FROLOVA Ksenia P.

Institute for Problems in Mechanical Engineering RAS

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

61 Bolshoi Ave. of V. Isl., St. Petersburg, 199178, Russian Federation

kspfrolova@gmail.com