

**МАКРОСКОПИЧЕСКИЕ КОЭФФИЦИЕНТЫ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ
И ДИФФУЗИИ В МИКРОНЕОДНОРОДНЫХ ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ**

В. В. Болотин, В. Н. Москаленко

(Москва)

Дается метод вычисления макроскопических коэффициентов теплопроводности (диффузии) для микронеоднородных твердых тел, локальные коэффициенты теплопроводности (диффузии) которых образуют эргодическое однородное случайное поле. В случае сильной изотропии поля локальных коэффициентов вычисления доводятся до конца. Окончательные формулы по структуре не на много сложнее, чем соответствующие формулы первого приближения. Приводятся результаты вычислений для некоторых других случаев. Обсуждается влияние анизотропии кристаллитов на коэффициенты теплопроводности (диффузии) поликристаллического материала.

Одной из центральных задач механики микронеоднородных тел является определение макроскопических постоянных по соответствующим микроскопическим характеристикам. Используемое рядом авторов [1,2] предположение о малой микронеоднородности неприменимо в случае изотропных поликристаллов, состоящих из существенно анизотропных кристаллитов, стохастических армированных сред и т. д. Некоторые перспективы открывает так называемый метод самосогласованного поля [3], но этот метод является приближенным, и еще нет оценки его погрешности. Все же при некоторых достаточно общих предположениях о корреляционных свойствах неоднородности удается получить конечные точные формулы для таких макроскопических характеристик твердых тел, как коэффициенты теплопроводности, диффузии, упругости и температурного расширения. Ниже рассмотрены простейшие задачи об определении макроскопических постоянных, образующих тензор второго ранга и характеризующих распределение в микронеоднородном теле некоторой скалярной величины.

1. Пусть скалярная величина $\theta(\mathbf{r})$, где $\mathbf{r} = (x_1, x_2, x_3)$, удовлетворяет уравнению

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\lambda_{jk} \frac{\partial \theta}{\partial x_k} \right) = 0 \quad (1.1)$$

(здесь и в дальнейшем использовано соглашение о суммировании по «немым» индексам). Коэффициенты λ_{jk} определяют в каждой точке поля некоторый симметричный положительно определенный тензор второго ранга. Уравнение (1.1) может описывать стационарное распределение температуры в твердом теле, стационарное распределение концентраций и т. п. Соответственно тензорное поле $\lambda_{jk}(\mathbf{r})$ будет описывать распределение локальных коэффициентов теплопроводности, коэффициентов диффузии и т. п. Для определенности будем в дальнейшем трактовать уравнение (1.1), как уравнение теплопроводности в твердом теле для стационарного случая.

Рассмотрим уравнение (1.1) в предположении, что тело имеет неоднородную микроструктуру, и поэтому коэффициенты теплопроводности $\lambda_{jk}(\mathbf{r})$ образуют случайное поле. Размеры тела будем считать настолько большими, по сравнению с масштабами неоднородности и корреляции, что можно полагать тело неограниченным. Поле же $\lambda_{jk}(\mathbf{r})$ будем считать однородным и эргодическим. Рассмотрим, например, среду, состоящую из кристаллитов одного рода. Пусть μ_{jk} — тензор теплопроводности для кристаллита, отнесенный к кристаллографическим осям. Этот тензор предполагается детерминированным и равным для всех точек поля. Пере-

ходя к лабораторной системе координат, получим

$$\lambda_{jk} = c_{j\alpha} c_{k\beta} \mu_{\alpha\beta} \quad (1.2)$$

где $c_{j\alpha}$ — матрица преобразования координат. Представим теперь λ_{jk} и μ_{jk} в виде

$$\lambda_{jk} = \lambda_{jk}' + \lambda_{jk}'', \quad \mu_{jk} = \mu_{jk}' + \mu_{jk}'' \quad (1.3)$$

где $\lambda_{jk}' = \mu_{jk}' = \langle \hat{\lambda}_{jk} \rangle$ — математические ожидания тензоров (здесь и в дальнейшем угловыми скобками обозначается операция осреднения), λ_{jk}'' и μ_{jk}'' — флуктуационные составляющие. В статье [2] полагалось, что $\lambda_{jk}'' \sim \varepsilon \lambda_{jk}'$, где ε — малое число. В данной работе не делается предположения о малости флуктуационных составляющих.

Сформулируем граничные условия, соответствующие уравнению (1.1). Поскольку тело полагается неограниченным, а поле $\lambda_{jk}(\mathbf{r})$ — однородным, то естественно поставить стохастические граничные условия, требуя, чтобы математические ожидания температуры были во всех точках равны заданным значениям. В случае постоянного во всем объеме температурного градиента получим условия

$$\langle \partial\theta / \partial x_j \rangle = p_j \quad (1.4)$$

где p_j — заданный вектор. Задача состоит в нахождении вероятностных характеристик поля $\theta(\mathbf{r})$, удовлетворяющего уравнению (1.1) и условию (1.4), и вычислении эквивалентного тензора теплопроводности для однородного тела (макроскопического тензора теплопроводности). Этот тензор естественно ввести из условия равенства математического ожидания теплого потока в микронеоднородном теле и теплового потока в эквивалентном однородном теле

$$\langle \lambda_{jk} \partial\theta / \partial x_k \rangle = \lambda_{jk}^* p_k \quad (1.5)$$

Уравнение (1.1) и условия (1.4) эквивалентны интегро-дифференциальному уравнению

$$\theta(\mathbf{r}) - \int G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1) \frac{\partial}{\partial x_{j_1}} \left[\lambda_{j_1 k_1}''(\mathbf{r}_1) \frac{\partial\theta(\mathbf{r}_1)}{\partial x_{k_1}} \right] d\mathbf{r}_1 = p_j x_j \quad (1.6)$$

где $d\mathbf{r}_1 = dx_{1_1} dx_{2_1} dx_{3_1}$, а $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1)$ — функция Грина для уравнения стационарной теплопроводности в однородной среде с тензором λ_{jk}'

$$\lambda_{jk}' \partial^2 G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1) / \partial x_j \partial x_k = -\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) \quad (1.7)$$

Если $\lambda_{jk}''(\mathbf{r})$ — однородное эргодическое поле, то $\theta(\mathbf{r})$ образует случайное поле с однородными эргодическими приращениями. Для удобства перейдем от уравнения (1.7) к эквивалентному интегро-дифференциальному уравнению для градиента $\partial\theta / \partial x_j$. Дифференцируя (1.7) почленно, используя свойство функции Грина $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1) = G(\boldsymbol{\rho})$, где $\boldsymbol{\rho} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}$, и интегрируя по частям, получим

$$\frac{\partial\theta}{\partial x_j} - \int \frac{\partial^2 G(\boldsymbol{\rho})}{\partial \xi_j \partial \xi_k} \left[\lambda_{kl}''(\mathbf{r} + \boldsymbol{\rho}) \frac{\partial\theta(\mathbf{r} + \boldsymbol{\rho})}{\partial \xi_l} \right] d\boldsymbol{\rho} = p_j \quad (1.8)$$

Здесь $\xi_j = x_{j_1} - x_j$, $d\boldsymbol{\rho} = d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3$. Уравнение (1.8) решаем методом итераций

$$\begin{aligned} \frac{\partial\theta(\mathbf{r})}{\partial x_j} = p_j + p_k \sum_{N=1}^{\infty} \int \dots \int \frac{\partial^2 G(\boldsymbol{\rho}_1)}{\partial \xi_{j_1} \partial \xi_{\beta_1}} \dots \frac{\partial^2 G(\boldsymbol{\rho}_N)}{\partial \xi_{\alpha_N} \partial \xi_{\beta_N}} \lambda_{\beta_1 \alpha_2}''(\mathbf{r} + \boldsymbol{\rho}_1) \dots \\ \dots \lambda_{\beta_N \alpha_N}''(\mathbf{r} + \boldsymbol{\rho}_1 + \dots + \boldsymbol{\rho}_N) d\boldsymbol{\rho}_1 \dots d\boldsymbol{\rho}_N \end{aligned} \quad (1.9)$$

Для математических ожиданий тепловых потоков получаем соотношение

$$\langle \lambda_{jk} \frac{\partial \theta}{\partial x_k} \rangle = \lambda_{jk}' p_k + p_l \sum_{N=1}^{\infty} \int \dots \int \frac{\partial^2 G(\rho_1)}{\partial \xi_{\alpha_1} \partial \xi_{\beta_1}} \dots \frac{\partial^2 G(\rho_N)}{\partial \xi_{\alpha_N} \partial \xi_{\beta_N}} \langle \lambda_{j\alpha_1}''(0) \lambda_{\beta_1\alpha_2}''(\rho_1) \dots \dots \lambda_{\beta_N l}''(\rho_1 + \dots + \rho_N) \rangle d\rho_1 \dots d\rho_N$$

Отсюда по определению (1.5) находим тензор макроскопических коэффициентов теплопроводности

$$\lambda_{jk}^* = \lambda_{jk}' + \sum_{N=1}^{\infty} \int \dots \int \frac{\partial^2 G(\rho_1)}{\partial \xi_{\alpha_1} \partial \xi_{\beta_1}} \dots \frac{\partial^2 G(\rho_N)}{\partial \xi_{\alpha_N} \partial \xi_{\beta_N}} \langle \lambda_{j\alpha_1}''(0) \lambda_{\beta_1\alpha_2}''(\rho_1) \dots \dots \lambda_{\beta_N k}''(\rho_1 + \dots + \rho_N) \rangle d\rho_1 \dots d\rho_N \quad (1.10)$$

Удержание в формуле (1.10) одного члена ряда ($N = 1$) соответствует борновскому приближению [1,2]. Задача состоит в том, чтобы при возможно более широких предположениях относительно свойств тензоров λ_{jk}' и λ_{jk}'' вычислить общий член ряда (1.10) и произвести фактическое суммирование. Формулу (1.10) можно представить также в виде

$$\lambda_{jk}^* = \lambda_{jk}' + \langle \lambda_{jk}^{**} \rangle \quad (1.11)$$

Тензор λ_{jk}^{**} является решением интегрального уравнения

$$\lambda_{jk}^{**}(\mathbf{r}) = \lambda_{j\alpha}''(\mathbf{r}) \int \frac{\partial^2 G(\rho)}{\partial \xi_{\alpha} \partial \xi_{\beta}} [\lambda_{\beta k}^{**}(\mathbf{r} + \rho) + \lambda_{\beta l}''(\mathbf{r} + \rho)] d\rho \quad (1.12)$$

Применение к уравнению (1.12) метода итераций приводит снова к (1.10).

2. Пусть поле коэффициентов $\lambda_{jk}(\mathbf{r})$ является сильно изотропным в том смысле, что корреляционные функции тензора $\lambda_{jk}(\mathbf{r})$ и соответствующего ему тензора $\lambda_{jk}^{**}(\mathbf{r})$ образуют изотропное тензорное поле. Это ограничение, вообще говоря, более жесткое, чем требование изотропии корреляционных функций для $\lambda_{jk}(\mathbf{r})$. Поликристаллы, постоянные которого удовлетворяют условию сильной изотропии, будем называть сильно изотропным. Для такого поликристалла $\lambda_{jk}' = \lambda_0 \delta_{jk}$, где λ_0 — математическое ожидание коэффициента теплопроводности,

$$G(\rho) = (4\pi\lambda_0\rho)^{-1}, \quad \rho = (\xi_j^2)^{1/2} \quad (2.1)$$

При этом корреляционные тензоры

$$\begin{aligned} \langle \lambda_{j\alpha_1}''(\mathbf{r}) \dots \lambda_{\beta_{N-1}\alpha_N}''(\mathbf{r}) \lambda_{\beta_N k}''(\mathbf{r} + \rho) \rangle &= \varphi_{j\alpha_1 \dots \beta_N k} \\ \langle \lambda_{j\alpha_1}''(\mathbf{r}) \dots \lambda_{\beta_{N-1}\alpha_N}''(\mathbf{r}) \lambda_{\beta_N k}^{**}(\mathbf{r} + \rho) \rangle &= \psi_{j\alpha_1 \dots \beta_N k} \end{aligned} \quad (2.2)$$

зависят лишь от расстояния $\rho = (\xi_j^2)^{1/2}$ между точками.

Математическое ожидание тензора λ_{jk}^{**} вычислим, используя уравнение (1.12)

$$\langle \lambda_{jk}^{**} \rangle = \int \frac{\partial^2 G(\rho)}{\partial \xi_{\alpha} \partial \xi_{\beta}} [\varphi_{j\alpha\beta k}(\rho) + \psi_{j\alpha\beta k}(\rho)] d\rho$$

Замечая, что

$$\frac{\partial^2 G(\rho)}{\partial \xi_{\alpha} \partial \xi_{\beta}} = -\frac{1}{3\lambda_0} \delta_{\alpha\beta} \delta(\rho) + \frac{1}{4\pi\lambda_0} \left(\frac{3\xi_{\alpha} \xi_{\beta}}{\rho^3} - \frac{\delta_{\alpha\beta}}{\rho^3} \right)$$

и переходя к интегрированию по сферическим координатам ρ , φ , θ , найдем

$$\langle \lambda_{jk}^{**} \rangle = -\frac{1}{3\lambda_0} [\varphi_{j\alpha\alpha k}(0) + \psi_{j\alpha\alpha k}(0)] + \\ + \frac{1}{4\pi\lambda_0} \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^\pi [\varphi_{j\alpha\beta k}(\rho) + \psi_{j\alpha\beta k}(\rho)] \left(\frac{3\xi_\alpha \xi_\beta}{\rho^3} - \frac{\delta_{\alpha\beta}}{\rho} \right) \sin\theta \, d\rho \, d\varphi \, d\theta$$

Интегрируя по сфере $\rho = \text{const}$, убеждаемся, что интеграл, входящий в эту формулу, равен нулю. Таким образом,

$$\langle \lambda_{jk}^{**} \rangle = -1/3\lambda_0^{-1} [\varphi_{j\alpha\alpha k}(0) + \psi_{j\alpha\alpha k}(0)]$$

Повторяя процедуру и учитывая формулу (1.10), получаем окончательно

$$\lambda_{jk}^* = \lambda_0 \delta_{jk} + \sum_{N=1}^{\infty} I_{jk}^{(N)}, \quad I_{jk}^{(N)} = \left(-\frac{1}{3\lambda_0} \right)^N \langle \lambda_{j\alpha_1}'' \lambda_{\alpha_1 \alpha_2}'' \dots \lambda_{\alpha_N k}'' \rangle \quad (2.3)$$

Выразим теперь тензор (2.3) через тензор теплопроводности μ_{jk} в кристаллографических координатах. Пусть μ_{jk}'' — флуктуационная часть этого тензора. Тогда с учетом соотношений типа (1.2) представим одноточечный корреляционный тензор, входящий в (2.3), так:

$$\langle \lambda_{j\alpha_1}'' \lambda_{\beta_1 \alpha_2}'' \dots \lambda_{\beta_N k}'' \rangle = \langle c_{j\gamma_1} c_{\alpha_1 \gamma_2} \dots c_{\beta_N \gamma_{2N+1}} c_{k \gamma_{2N+2}} \rangle \mu_{\gamma_1 \gamma_2}'' \dots \mu_{\gamma_{2N+1} \gamma_{2N+2}}''$$

Свертывая тензор, как указано в формуле (2.3), и замечая, что

$$c_{\alpha\gamma_1} c_{\alpha\gamma_2} = \delta_{\gamma_1 \gamma_2}, \quad \langle c_{(\alpha) \gamma_1} c_{(\alpha) \gamma_2} \rangle = 1/3 \delta_{\gamma_1 \gamma_2}$$

получим

$$\langle \lambda_{j\alpha_1}'' \lambda_{\alpha_1 \alpha_2}'' \dots \lambda_{\alpha_N k}'' \rangle = \frac{1}{3} \delta_{jk} \sum_{a=1}^3 (\mu_a'')^{N+1} \quad (2.4)$$

Здесь μ_a'' — главные значения тензора $\mu_{\alpha\beta}''$ (здесь и в дальнейшем на индекс a правило суммирования по немим индексам не распространяется). Формула (1.10) с учетом (2.3) и (2.4) принимает вид $\lambda_{jk}^* = \lambda_* \delta_{jk}$, где

$$\frac{\lambda_*}{\lambda_0} = 1 - \sum_{N=2}^{\infty} \sum_{a=1}^3 \left(-\frac{\mu_a''}{3\lambda_0} \right)^N \quad (2.5)$$

В правой части стоит сходящийся ряд. Сумма ряда (2.5), как нетрудно проверить, равна

$$\frac{\lambda_*}{\lambda_0} = 1 - \sum_{a=1}^3 \left(\frac{\mu_a''}{3\lambda_0} \right)^2 \left(1 + \frac{\mu_a''}{3\lambda_0} \right)^{-1} \quad (2.6)$$

3. Формула (2.6) дает точное значение макроскопического коэффициента теплопроводности для микронеоднородного тела с сильной изотропией. Используем ее для оценки различных приближенных методов. Если кристаллиты являются слабо анизотропными, то поликристалл будет обладать малой неоднородностью. Этот случай был рассмотрен в статье [2]. Чтобы получить формулу, соответствующую предположениям статьи [2], заменим μ_a'' на $\varepsilon \mu_a''$, где ε — параметр малости, и разложим правую часть формулы (2.6) в ряд по степеням ε . Удерживая члены порядка ε^2 , найдем

$$\frac{\lambda_*}{\lambda_0} \approx 1 - \frac{\varepsilon^2}{9\lambda_0^2} \sum_{a=1}^3 (\mu_a'')^2 \quad (3.1)$$

Пусть, например, кристаллит имеет одну ось симметрии. Обозначим главные значения тензора μ_{jk} через $\mu_1 = \mu_2 = \mu_{\perp}$, $\mu_3 = \mu_{\parallel}$. Тогда

$$\lambda_0 = \frac{2}{3}\mu_{\perp} + \frac{1}{3}\mu_{\parallel}, \quad \mu_1'' = \mu_2'' = -\frac{1}{3}(\mu_{\parallel} - \mu_{\perp}), \quad \mu_3'' = \frac{2}{3}(\mu_{\parallel} - \mu_{\perp}) \quad (3.2)$$

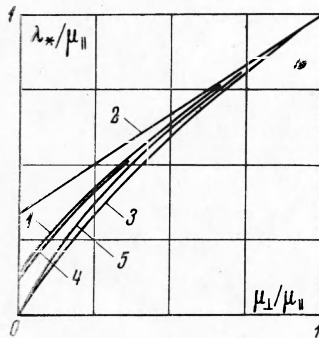
Точная формула (2.6) принимает вид

$$\frac{\lambda_*}{\lambda_0} = 1 - \frac{4p^2}{3(3+2p)} - \frac{2p^2}{3(3-p)} \quad \left(p = \frac{\mu_{\parallel} - \mu_{\perp}}{\mu_{\parallel} + 2\mu_{\perp}} \right) \quad (3.3)$$

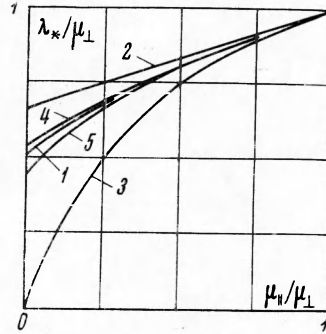
Формула (3.1) для случая (3.2) имеет вид (принято, что $\varepsilon = 1$)

$$\lambda_* / \lambda_0 = 1 - \frac{2}{3} p^2 \quad (3.4)$$

При малых p (т. е. при $\mu_{\parallel} \approx \mu_{\perp}$) формулы (3.3) и (3.4) дают близкие результаты. При $p \rightarrow 1$ (т. е. при $\mu_{\perp} / \mu_{\parallel} \rightarrow 0$) формула (3.3) дает $\lambda_* \rightarrow \frac{2}{5} \lambda_0$. Выражение же (3.4), формально распространенное на случай больших неоднородностей, дает $\lambda_* \rightarrow \frac{1}{3} \lambda_0$.



Фиг. 1



Фиг. 2

В противоположном случае ($\mu_{\parallel} / \mu_{\perp} \rightarrow 0$) имеем $p \rightarrow -\frac{1}{2}$. Тогда по формуле (3.3) $\lambda_* \rightarrow \frac{11}{14} \lambda_0$, а по формуле (3.4) $\lambda_* \rightarrow \frac{5}{6} \lambda_0$. График зависимости отношения $\lambda_* / \mu_{\parallel}$ от отношения $\mu_{\perp} / \mu_{\parallel}$ представлен на фиг. 1. На фиг. 2 представлен график зависимости λ_* / μ_{\perp} от отношения $\mu_{\parallel} / \mu_{\perp}$. Линия 1 соответствует точной формуле (3.3), линия 4 — формуле (3.4). Для полноты на график нанесены линии 2 и 3, соответствующие приближенным значениям λ_* , которые получаются простым осреднением коэффициентов теплопроводности (кривая 2) и коэффициентов термического сопротивления (кривая 3). Как видно из графика, первое (борновское) приближение дает удовлетворительные результаты и в случае немалых неоднородностей. Пусть, например, $\mu_{\perp} = \frac{1}{2} \mu_{\parallel}$. Тогда $p = \frac{1}{4}$, и расхождение между формулами (3.3) и (3.4) составляет 0,3 %.

Оценим погрешность, которую дает в этой задаче метод самосогласованного поля. Следуя этому методу, рассмотрим задачу стационарной теплопроводности в изотропном пространстве, содержащем анизотропное включение в виде кристаллита шаровой формы радиуса R . Полагая, что тензор коэффициентов теплопроводности изотропной среды совпадает с тензором макроскопических коэффициентов теплопроводности $\lambda_{jk}^* = \lambda_* \delta_{jk}$, найдем этот тензор из условия, что градиент температуры, осредненный по объему кристаллита и ансамблю реализаций, совпадает с математическим ожиданием градиента температуры в поликристалле. Пусть

$$\lambda_{jk} = \lambda_{jk}^* + \lambda_{jk}^{**}, \quad \lambda_{jk}^* = \lambda_* \delta_{jk}, \quad \mu_{jk} = \lambda_* \delta_{jk} + \mu_{jk}^{**}$$

Тогда для определения градиента температуры получим интегральное уравнение типа (1.8).

$$\frac{\partial \theta(\mathbf{r})}{\partial x_j} - \int \frac{\partial^2 G(\rho - \mathbf{r})}{\partial \xi_j \partial \xi_k} \lambda_{jk}^{**}(\rho) \frac{\partial \theta(\rho)}{\partial \xi_l} d\rho = p_j \quad (3.5)$$

Учитывая, что для принятой модели

$$\lambda_{jk}^{**} \equiv 0 \quad \text{при } |\mathbf{r}| > R$$

$$\lambda_{jk}^{**}(\mathbf{r}) = c_{j\alpha} c_{k\beta} \mu_{\alpha\beta}^{**} = \text{const} \quad \text{при } |\mathbf{r}| \leq R$$

преобразуем уравнение (3.5) к виду

$$\frac{\partial \theta(\mathbf{r})}{\partial x_j} - c_{k\alpha} c_{l\beta} \mu_{\alpha\beta}^{**} \int_{|\rho| \leq R} \frac{\partial^2 G(\rho - \mathbf{r})}{\partial \xi_j \partial \xi_k} \frac{\partial \theta(\rho)}{\partial \xi_l} d\rho = p_j \quad (3.6)$$

Осредним градиент температуры по объему кристаллита. С этой целью проинтегрируем уравнение (3.6) по объему $|\mathbf{r}| \leq R$

$$p_j^0 - c_{k\alpha} c_{l\beta} \mu_{\alpha\beta}^{**} \frac{1}{V} \int_{|\mathbf{r}| \leq R} d\mathbf{r} \int_{|\rho| \leq R} \frac{\partial^2 G(\rho - \mathbf{r})}{\partial \xi_j \partial \xi_k} \frac{\partial \theta(\rho)}{\partial \xi_l} d\rho = p_j$$

Меняя порядок интегрирования и дифференцирования, представим это выражение в виде

$$p_j^0 = c_{k\alpha} c_{l\beta} \mu_{\alpha\beta}^{**} \frac{1}{V} \int_{|\rho| \leq R} \frac{\partial \theta(\rho)}{\partial \xi_l} \frac{\partial^2}{\partial \xi_j \partial \xi_k} \left[\int_{|\mathbf{r}| \leq R} G(\rho - \mathbf{r}) d\mathbf{r} \right] d\rho = p_j$$

Учитывая, что

$$\int_{|\mathbf{r}| \leq R} G(\rho - \mathbf{r}) d\mathbf{r} = \frac{1}{2\lambda_*} \left(R^2 - \frac{1}{3} \rho^2 \right)$$

и дифференцируя, находим для градиента температуры p_j^0 , осредненного по объему кристаллита, уравнение

$$(2\lambda_*^* \delta_{jk} + c_{j\alpha} c_{k\beta} \mu_{\alpha\beta}) p_k^0 = 3\lambda_* p_j \quad (3.7)$$

Определитель уравнений (3.7) не зависит от направляющих косинусов и равен

$$D = 8\lambda_*^3 + 4\lambda_* (\mu_1 + \mu_2 + \mu_3) + 2\lambda_*^2 (\mu_1 \mu_2 + \mu_2 \mu_3 + \mu_3 \mu_1) + \mu_1 \mu_2 \mu_3$$

Находя из уравнений (3.7) p_1^0 и осредняя по ориентациям, получим из условия $\langle p_1^0 \rangle = p_1$ уравнение для эффективного коэффициента теплопроводности

$$4\lambda_*^2 - \frac{1}{5}\lambda_* [6(\mu_1 \mu_2 + \mu_2 \mu_3 + \mu_3 \mu_1) - (\mu_1^2 + \mu_2^2 + \mu_3^2)] - \mu_1 \mu_2 \mu_3 = 0 \quad (3.8)$$

При $\mu_1 \mu_2 \mu_3 \neq 0$ это уравнение имеет только один вещественный положительный корень. Это вытекает из факта, что сумма трех корней равна нулю, а их произведение положительно. Результаты вычислений для случая $\mu_1 = \mu_2 = \mu_{\perp}$, $\mu_3 = \mu_{\parallel}$ представлены на фиг. 1, 2 линией 5. Как следует из графиков, метод самосогласованного поля дает хорошие результаты даже при весьма существенной анизотропии кристаллитов.

4. Вычисления могут быть доведены до конца и в некоторых других случаях. Рассмотрим, например, поле $\lambda_{jk}(\mathbf{r})$, обладающее следующими свойствами: в плоскости x_1x_2 оно является сильно изотропным в смысле определения, данного в п. 2, а ось x_3 является главной осью тензора λ_{jk} в каждой точке, причем компонента λ_{33} детерминирована. К средам такого типа могут быть отнесены некоторые хаотически армированные стеклопластики, получаемые путем прессования. Ограничимся определенным макроскопическими коэффициентами теплопроводности в плоскости x_1x_2 . В этом случае приходим к плоской задаче для уравнения (1.1) с условиями (1.4) и функцией Грина

$$G(\rho) = (2\pi\lambda_0)^{-1} \ln \rho, \quad \rho = (\xi_j^2)^{1/2} \quad (j = 1, 2) \tag{4.1}$$

Формулы (1.11) и (2.2) остаются в силе. Для вычисления тензоров $I_{jk}^{(N)}$ воспользуемся полярными координатами. Вычисления приводят к формуле, аналогичной (2.3)

$$I_{jk}^{(N)} = \left(-\frac{1}{2\lambda_0} \right)^N \langle \lambda_{j\alpha_1}'' \lambda_{\alpha_1\alpha_2}'' \dots \lambda_{\alpha_N k}'' \rangle$$

Используя формулу типа (1.2) и замечая, что для плоской задачи

$$\langle c_{(\alpha)\gamma_1} c_{(\alpha)\gamma_2} \rangle = 1/2 \delta_{\gamma_1\gamma_2}$$

по α не суммировать), найдем, что

$$\langle \lambda_{j\alpha_1}'' \lambda_{\alpha_1\alpha_2}'' \dots \lambda_{\alpha_N k}'' \rangle = \frac{1}{2} \delta_{jk} \sum_{\alpha=1}^2 (\mu_\alpha'')^{N+1}$$

Отсюда после возвращения к (1.11) получим, что $\lambda_{jk}^* = \lambda_* \delta_{jk}$, где

$$\frac{\lambda_*}{\lambda_0} = 1 - \sum_{N=2}^{\infty} \left(-\frac{1}{2\lambda_0} \right)^N \sum_{\alpha=1}^2 (\mu_\alpha'')^N \tag{4.2}$$

Сумма в формуле (4.2) легко вычисляется и составляет с учетом $\mu_1'' = -\mu_2''$

$$\lambda_* / \lambda_0 = 1 - (\mu_1'' / 2\lambda_0)^2 [1 + (\mu_1'' / 2\lambda_0)^2]^{-1} \tag{4.3}$$

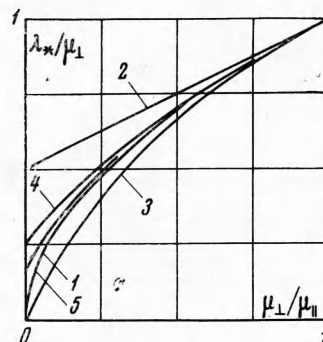
Нетрудно вычислить соответствующее первое (борновское) приближение

$$\lambda_* / \lambda_0 = 1 - (\mu_1'' / 2\lambda_0)^2 \tag{4.4}$$

Обозначим главные значения тензора μ_{jk} через $\mu_1 = \mu_{\perp}$, $\mu_2 = \mu_{\parallel}$. График точной зависимости $\lambda_* / \mu_{\parallel}$ от отношения $\mu_{\perp} / \mu_{\parallel}$ представлен на фиг. 3 линией 1. Кривая 2 соответствует осредненному коэффициенту теплопроводности, кривая 3 — осредненному коэффициенту термического сопротивления, кривая 4 построена по формуле борновского приближения (4.4). Метод самосогласованного поля дает в данном случае формулу

$$\lambda_* = (\mu_1 \mu_2)^{1/2}$$

по которой построена кривая 5. Как видно из графика, борновское приближение и метод самосогласованного поля и в этой задаче имеют более широкую область применения, чем это следует из полуинтуитивных соображений.



Фиг. 3

Поступила 16 V 1967

ЛИТЕРАТУРА

1. Л и ф ш и ц И. М., Р о з е н ц в е й г Л. Н. К теории упругих свойств поликристаллов. Ж. эксперим. и теор. физ., 1946, т. 16, № 11.
2. Д о л г о и о л о в Д. Г. О коэффициенте диффузии в поликристаллах. Физика металлов и металловедение, 1962, т. 13, № 2.
3. H i l l R. Continuum micro-elasticity of elastoplastic polycrystals. J. Mech. Phys. Solids, 1965, vol. 13, No. 1.