中国科学

1987 年12月 A 辑 第12期

晶体塑性理论的极值原理

王 自 强

(中国科学院力学研究所，北京)

摘 要

本文基于晶体塑性增量理论，讨论了给定应力率或给定应变率的情况下，滑移剪切率的确定方法；提出了相应的多变量函数的极值原理；把问题归结为二次凸规划问题.

对于晶体在外力作用下塑性响应问题，本文提出了两个新的与边值问题等价的极值原理. 在这些极值原理中，滑移剪切率将作为独立宗量，通过变分方程求得.

一、引 言

关于晶体塑性理论的发展可以追溯到 Taylor[1] 的早期工作. Taylor 提出的均匀滑移模型，比较真实地反映了晶体内大量位错沿着特定的结晶学平面滑移所造成的宏观效应. 对晶体塑性变形几何学的严格描述是由 Hill[2], Rice[3] 和 Asaro[4] 所完成的.

对于给定的塑性应变率，可以从所有可能的滑移系中选择一组滑移系适应给定的塑性应变率. 这种选择不是唯一的. Taylor[5] 的最小塑性功耗原理证实，如果对一切运动许可的滑移剪切率进行比较，那么，真实的一组剪切率将产生最小的塑性功耗. 而 Bishop 和 Hill[6] 则发现一切静力许可的应力场中，真实的应力场产生最大的塑性功.

但是，对于晶体塑性增量理论而言，在变形过程的每一瞬时，晶体内部各点的应力状态是已知的；哪些滑移系处于临界状态，哪些滑移系不处于临界状态均是确定的. 问题的焦点在对于进一步的增量变形，哪些处于临界状态的滑移系继续开动，哪些停止开动，需要加以确定，同时要求出相应的剪切率. 本文分析了这个问题，提出了相应的极小值原理，把问题归结为二次凸规划问题.

单晶固体在外力作用下的弹塑性变形问题是一个十分复杂问题，一般说来难以求得精确解. 而数值解却可以借助于现代计算机得到很有效的结果. 在这种情况下，建立与边值问题等价的变分原理显得十分重要. 本文提出了两个新的极值原理.

二、确定 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ 的极值原理

讨论微小变形问题. 变形率张量 $\mathbf{D}$ 可表示为[4]:

$$\mathbf{D} = \mathbf{D}^e + \mathbf{D}^p, \tag{2.1}$$

本文 1986 年 12 月 19 日收到，1987 年 3 月 18 日收到修改稿.

$$\mathbf{D}^p=\sum_{\alpha=1}^{n}\mathbf{P}^{(\alpha)}\dot{\gamma}^{(\alpha)},\tag{2.2}$$

$$\mathbf{P}^{(\alpha)}=\frac{1}{2}(\mathbf{m}^{(\alpha)}\otimes\mathbf{n}^{(\alpha)}+\mathbf{n}^{(\alpha)}\otimes\mathbf{m}^{(\alpha)}),\tag{2.3}$$

其中 $\mathbf{m}^{(\alpha)}$ 表示第 α 滑移系滑移方向的单位矢量，$\mathbf{n}^{(\alpha)}$ 则表示滑移面的法线方向的单位矢量，$\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ 表示第 α 滑移系的滑移剪切率.

率无关材料的硬化规律通常表示为：

$$\begin{aligned}\dot{\tau}^{(\alpha)}=\dot{\tau}_c^{(\alpha)}=\sum_{\beta=1}^{n}h_{\alpha\beta}\dot{\gamma}^{(\beta)},\ \text{对}\ \dot{\gamma}^{(\alpha)}>0,\\ \dot{\tau}^{(\alpha)}\leqslant\dot{\tau}_c^{(\alpha)}=\sum_{\beta=1}^{n}h_{\alpha\beta}\dot{\gamma}^{(\beta)},\ \text{对}\ \dot{\gamma}^{(\alpha)}=0.\end{aligned}\tag{2.4}$$

以上公式适用于处于临界状态的滑移系，其中 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}>0$，表示滑移系 (α) 继续开动；$\dot{\gamma}^{(\alpha)}=0$ 则表示滑移系 (α) 停止开动. 对不处于临界状态的滑移系 (ρ)，恒有：

$$\tau^{(\rho)}<\tau_c^{(\rho)},\ \dot{\gamma}^{(\rho)}=0,$$

这里 $\tau^{(\alpha)}$ 是作用在第 α 滑移平面上沿 $\mathbf{m}^{(\alpha)}$ 方向的分解剪应力，

$$\tau^{(\alpha)}=\boldsymbol{\sigma}:\mathbf{P}^{(\alpha)},\ \dot{\tau}^{(\alpha)}=\dot{\boldsymbol{\sigma}}:\mathbf{P}^{(\alpha)},\tag{2.5}$$

$\tau_c^{(\alpha)}$ 是第 α 滑移系的临界剪应力.

弹性本构定律归结为：

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}}=\mathscr{L}:\mathbf{D}^e,\tag{2.6}$$

$\mathscr{L}$ 是瞬时的弹性模量张量.

对于给定的应力率 $\dot{\boldsymbol{\sigma}}$，要确定相应的应变率张量，首先要判断哪些滑移系停止开动，哪些滑移系继续开动以及相应的剪切率 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$. 为此，我们提出一种一般的分析方法.

由弹性本构定理，立即可推得应变率张量 $\mathbf{D}^e$. 由 (2.5) 式，可得到 $\dot{\tau}^{(\alpha)}$. 凡是对应于 $\dot{\tau}^{(\alpha)}<0$ 的滑移系 (α)，必然停止开动. 从所有处于临界状态的滑移系中删去 $\dot{\tau}^{(\alpha)}<0$ 的滑移系，然后由 1 至 n^* 重新加以编号. 这里，n^* 为处于临界状态且 $\dot{\tau}^{(\alpha)}\geqslant 0$ 的滑移系总数. 研究下述多变量函数 Π 的极小值问题，

$$\Pi=\frac{1}{2}\sum_{\alpha,\beta=1}^{n^*}h_{\alpha\beta}\tilde{\dot{\gamma}}^{(\alpha)}\tilde{\dot{\gamma}}^{(\beta)}-\sum_{\alpha=1}^{n^*}\dot{\tau}^{(\alpha)}\tilde{\dot{\gamma}}^{(\alpha)},\tag{2.7}$$

约束条件为：

$$\tilde{\dot{\gamma}}^{(\alpha)}\geqslant 0,\ \alpha=1,2,\cdots,n^*,\tag{2.8}$$

约束条件 (2.8) 所给出的可行域是 n^* 维欧氏空间中的闭凸集. 另外，当硬化系数矩阵 $[h_{\alpha\beta}]$ 是对称正定矩阵时，函数 Π 是多变量 $\tilde{\dot{\gamma}}^{(\alpha)}$ 的严格凸函数. 因此，上述问题归结为二次凸规划问题.

在极值点 $\{\dot{\gamma}^{(\alpha)}\}$ $(\alpha=1,2,\cdots,n^*)$ 处，必有[7]：

$$\begin{aligned}&\text{(i)}\quad \sum_{\beta=1}^{n^*}h_{\alpha\beta}\dot{\gamma}^{(\beta)}-\dot{\tau}^{(\alpha)}\geqslant 0,\\ &\text{(ii)}\ \left(\sum_{\beta=1}^{n^*}h_{\alpha\beta}\dot{\gamma}^{(\beta)}-\dot{\tau}^{(\alpha)}\right)\cdot\dot{\gamma}^{(\alpha)}=0,\qquad \alpha=1,2,\cdots,n^*,\end{aligned}\tag{2.9}$$

(2.9) 式等价于:

$$
\begin{aligned}
&\text{(i)} \quad \dot{\tau}^{(\alpha)} = \dot{\tau}_c^{(\alpha)} = \sum_{\beta=1}^{n^*} h_{\alpha\beta}\dot{\gamma}^{(\beta)}, \quad \dot{\gamma}^{(\alpha)} > 0, \\
&\text{(ii)} \quad \dot{\tau}^{(\alpha)} \leqslant \dot{\tau}_c^{(\alpha)} = \sum_{\beta=1}^{n^*} h_{\alpha\beta}\dot{\gamma}^{(\beta)}, \quad \dot{\gamma}^{(\alpha)} = 0, \\
&\qquad \alpha = 1, 2, \cdots, n^*.
\end{aligned}
\tag{2.10}
$$

(2.10) 式即是通用的硬化公式. 当硬化系数矩阵 $[h_{\alpha\beta}]$ 是对称正定矩阵时, $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ 给出函数 Π 的极小值. 还可证明,极小值问题的解答是唯一的. 事实上,若有两组解答 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ 及 $\dot{\gamma}_*^{(\alpha)}$,则下述自变量 $\tilde{\dot{\gamma}}^{(\alpha)}$ 也满足约束条件 (2.8).

$$
\begin{aligned}
\tilde{\dot{\gamma}}^{(\alpha)} &= \dot{\gamma}^{(\alpha)} + \varepsilon(\dot{\gamma}_*^{(\alpha)} - \dot{\gamma}^{(\alpha)}) \\
&= \varepsilon\dot{\gamma}_*^{(\alpha)} + (1-\varepsilon)\dot{\gamma}^{(\alpha)}, \quad 0 \leqslant \varepsilon \leqslant 1.
\end{aligned}
\tag{2.11}
$$

代入 (2.7) 式,得:

$$
\begin{aligned}
\Pi(\tilde{\dot{\gamma}}^{(\alpha)}) = &\frac{1}{2}\sum_{\alpha,\beta=1}^{n^*} h_{\alpha\beta}\dot{\gamma}^{(\alpha)}\dot{\gamma}^{(\beta)} - \sum_{\alpha=1}^{n^*}\dot{\tau}^{(\alpha)}\dot{\gamma}^{(\alpha)} \\
&+ \varepsilon\left\{\sum_{\alpha=1}^{n^*}\left[\sum_{\beta=1}^{n^*} h_{\alpha\beta}\dot{\gamma}^{(\beta)} - \dot{\tau}^{(\alpha)}\right](\dot{\gamma}_*^{(\alpha)} - \dot{\gamma}^{(\alpha)})\right\} \\
&+ \varepsilon^2\cdot\frac{1}{2}\sum_{\alpha,\beta=1}^{n^*} h_{\alpha\beta}(\dot{\gamma}_*^{(\alpha)} - \dot{\gamma}^{(\alpha)})(\dot{\gamma}_*^{(\beta)} - \dot{\gamma}^{(\beta)}),
\end{aligned}
$$

对固定的 $\dot{\gamma}_*^{(\alpha)}$ 及 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ 上式只是实变量 ε 的函数,其中带 ε^2 的项,总是大于或等于零,等号只当 $\dot{\gamma}_*^{(\beta)} = \dot{\gamma}^{(\beta)}$, $\beta = 1, 2, \cdots, n^*$ 时成立. 上式中带 ε 的项为:

$$
\begin{aligned}
&\varepsilon\left\{\sum_{\alpha=1}^{n^*}(\dot{\tau}_c^{(\alpha)} - \dot{\tau}^{(\alpha)})(\dot{\gamma}_*^{(\alpha)} - \dot{\gamma}^{(\alpha)})\right\} \\
&= \varepsilon\left\{\sum_{\alpha}(\dot{\tau}_c^{(\alpha)} - \dot{\tau}^{(\alpha)})\dot{\gamma}_*^{(\alpha)}\right\} \geqslant 0.
\end{aligned}
\tag{2.12}
$$

上式等号右端只对 $\dot{\gamma}^{(\alpha)} = 0$ 的滑移系求和,由此可看出

$$\Pi(\tilde{\dot{\gamma}}^{(\alpha)}) \geqslant \Pi(\dot{\gamma}^{(\alpha)}),$$

若取 $\varepsilon = 1$,得,

$$\Pi(\dot{\gamma}_*^{(\alpha)}) \geqslant \Pi(\dot{\gamma}^{(\alpha)}),$$

类似的可证明:

$$\Pi(\dot{\gamma}^{(\alpha)}) \geqslant \Pi(\dot{\gamma}_*^{(\alpha)}),$$

最后导致

$$
\begin{cases}
\Pi(\dot{\gamma}^{(\alpha)}) = \Pi(\dot{\gamma}_*^{(\alpha)}), \\
\quad \dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{\gamma}_*^{(\alpha)}, \quad \alpha = 1, 2, \cdots, n^*.
\end{cases}
\tag{2.13}
$$

现在来讨论给定塑性应变率张量 $\mathbf{D}^p$ 的情况. 在处于临界状态的所有滑移系中, 选择一切可能的滑移系组合. 一切满足下述式子的剪切率 $\tilde{\dot{\gamma}}^{(\alpha)}$ 称为运动许可的剪切率,

$$\sum_{\alpha=1}^{n} \mathbf{P}^{(\alpha)}\tilde{\dot{\gamma}}^{(\alpha)} = \mathbf{D}^p. \tag{2.14}$$

研究下述多变量函数 Π_1 的极小值问题

$$\Pi_1 = \frac{1}{2}\sum_{\alpha=1}^{n}\sum_{\beta=1}^{n} h_{\alpha\beta}\tilde{\gamma}^{(\alpha)}\tilde{\gamma}^{(\beta)}, \tag{2.15}$$

约束条件为方程(2.14)及(2.8).

引入Lagrange乘子 $\boldsymbol{\lambda}$,函数 Π_1 的极小值问题可转化为下述函数 Π_1^* 的驻值问题:

$$\Pi_1^* = \frac{1}{2}\sum_{\alpha,\beta=1}^{n} h_{\alpha\beta}\tilde{\gamma}^{(\alpha)}\tilde{\gamma}^{(\beta)} - \boldsymbol{\lambda}:\left(\sum_{\alpha=1}^{n}\mathbf{P}^{(\alpha)}\tilde{\gamma}^{(\alpha)} - \mathbf{D}^p\right). \tag{2.16}$$

设想 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$, $\boldsymbol{\lambda}$ 是函数 Π_1^* 的驻值点. $\dot{\gamma}_*^{(\alpha)}$ 是一组任意的运动许可的剪切率. $\boldsymbol{\lambda}_*$ 是任意的不同于 $\boldsymbol{\lambda}$ 的张量乘子. 则对任意的实变量 ε 及 δ, $0 \leqslant \varepsilon \leqslant 1$. 令

$$\tilde{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{\gamma}^{(\alpha)} + \varepsilon(\dot{\gamma}_*^{(\alpha)} - \dot{\gamma}^{(\alpha)}) \geqslant 0, \tag{2.17}$$

$$\bar{\boldsymbol{\lambda}} = \boldsymbol{\lambda} + \delta(\boldsymbol{\lambda}_* - \boldsymbol{\lambda}), \tag{2.18}$$

则有:

$$\begin{aligned}\Pi_1^*(\tilde{\gamma}^{(\alpha)}, \bar{\boldsymbol{\lambda}}) &= \Pi_1^*(\dot{\gamma}^{(\alpha)}, \boldsymbol{\lambda}) \\ &+ \varepsilon\left\{\sum_{\alpha=1}^{n}\left[\sum_{\beta=1}^{n} h_{\alpha\beta}\dot{\gamma}^{(\beta)} - \boldsymbol{\lambda}:\mathbf{P}^{(\alpha)}\right](\dot{\gamma}_*^{(\alpha)} - \dot{\gamma}^{(\alpha)})\right\} \\ &+ \frac{1}{2}\varepsilon^2\sum_{\alpha=1}^{n}\sum_{\beta=1}^{n} h_{\alpha\beta}(\dot{\gamma}_*^{(\alpha)} - \dot{\gamma}^{(\alpha)})(\dot{\gamma}_*^{(\beta)} - \dot{\gamma}^{(\beta)}) \\ &- \delta(\boldsymbol{\lambda}_* - \boldsymbol{\lambda}):\left[\sum_{\alpha=1}^{n}\mathbf{P}^{(\alpha)}\dot{\gamma}^{(\alpha)} - \mathbf{D}^p\right], \\ &- \varepsilon\delta(\boldsymbol{\lambda}_* - \boldsymbol{\lambda}):\left[\sum_{\alpha=1}^{n}\mathbf{P}^{(\alpha)}(\dot{\gamma}_*^{(\alpha)} - \dot{\gamma}^{(\alpha)})\right].\end{aligned} \tag{2.19}$$

对于固定的 $\dot{\gamma}_*^{(\alpha)}$, $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ 上式只是实变量 ε 及 δ 的函数,当 $\delta = 0$ 时,为了使函数 Π_1^* 在点 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ 处取极小,必有:

$$\sum_{\alpha=1}^{n}(\dot{\tau}_C^{(\alpha)} - \boldsymbol{\lambda}:\mathbf{P}^{(\alpha)})(\dot{\gamma}_*^{(\alpha)} - \dot{\gamma}^{(\alpha)}) \geqslant 0, \tag{2.20}$$

也就是说对于确定的Lagrange乘子 $\boldsymbol{\lambda}$,函数 Π_1^* 在约束条件(2.8)式之下的极小值问题,将导致(2.20)式. 另外函数 Π_1^* 在 $(\dot{\gamma}^{(\alpha)}, \boldsymbol{\lambda})$ 点驻值条件导致:

$$\sum_{\alpha=1}^{n}\mathbf{P}^{(\alpha)}\dot{\gamma}^{(\alpha)} - \mathbf{D}^p = 0, \tag{2.21}$$

(2.20)式中的 $\dot{\tau}_c^{(\alpha)}$ 为临界的分解剪应力率:

$$\dot{\tau}_C^{(\alpha)} = \sum_{\beta=1}^{n} h_{\alpha\beta}\dot{\gamma}^{(\beta)}. \tag{2.22}$$

若对滑移系 α, $\dot{\gamma}^{(\alpha)} > 0$,那么总可以在 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ 的附近两侧选择 $\dot{\gamma}_*^{(\alpha)}$. 也就是说 $\dot{\gamma}_*^{(\alpha)} - \dot{\gamma}^{(\alpha)}$ 既可以为正,也可以为负. 此时为了使(2.20)式得到满足,必有:

$$\dot{\tau}_c^{(\alpha)} = \boldsymbol{\lambda}:\mathbf{P}^{(\alpha)}, \qquad \dot{\gamma}^{(\alpha)} > 0, \tag{2.23}$$

另一方面,若对某个滑移系 α, $\dot{\gamma}^{(\alpha)} = 0$,此时,由于 $\dot{\gamma}_*^{(\alpha)} \geqslant 0$, 为了使方程(2.20)得到满足,必有:

$$\boldsymbol{\lambda}:\mathbf{P}^{(\alpha)} \leqslant \dot{\tau}_c^{(\alpha)}, \quad \dot{\gamma}^{(\alpha)} = 0. \tag{2.24}$$

将(2.23),(2.24)式与(2.4),(2.5)式比较,不难看出,只要令 $\boldsymbol{\lambda} = \dot{\boldsymbol{\sigma}}$,就可得到所需要的硬化

规律．这意味着 Lagrange 乘子即是 Cauehy 应力率张量．

此外，由公式推导过程不难看出，如果将 $\boldsymbol{\lambda}$ 作为选定的参量而不参与变分．同时假定硬化系数矩阵 $[h_{\alpha\beta}]$ 为对称正定矩阵，那么，极值点 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ 确实给出 Π_1^* 极小值．

进一步讨论给定变形率张量 $\mathbf{D}$ 的情况．依照 (2.14) 式，有，

$$\mathbf{D}^e = \mathbf{D} - \sum_{\alpha=1}^{n} \mathbf{P}^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)}. \tag{2.25}$$

设想 $\{\dot{\gamma}_*^{(\alpha)}\}$ 是一组满足约束条件 (2.8) 式的剪切率．引入

$$\tilde{\dot{\gamma}}^{(\alpha)} = \dot{\gamma}^{(\alpha)} + \varepsilon(\dot{\gamma}_*^{(\alpha)} - \dot{\gamma}^{(\alpha)}),\quad 0 \leqslant \varepsilon \leqslant 1. \tag{2.26}$$

研究下述多变量函数 Π_2 的极小问题：

$$\Pi_2 = \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta=1}^{n} g_{\alpha\beta} \tilde{\dot{\gamma}}^{(\alpha)} \tilde{\dot{\gamma}}^{(\beta)} - \sum_{\alpha=1}^{n} (\mathbf{P}^{(\alpha)} : \mathscr{L} : \mathbf{D}) \tilde{\dot{\gamma}}^{(\alpha)}, \tag{2.27}$$

其中 $\mathscr{L}$ 是弹性模量张量，$g_{\alpha\beta}$ 为：

$$g_{\alpha\beta} = h_{\alpha\beta} + \mathbf{P}^{(\alpha)} : \mathscr{L} : \mathbf{P}^{(\beta)}. \tag{2.28}$$

我们有，

$$\begin{aligned}\Pi_2(\tilde{\dot{\gamma}}^{(\alpha)}) - \Pi_2(\dot{\gamma}^{(\alpha)}) = \varepsilon \Bigg\{ \sum_{\alpha=1}^{n} \Bigg[\sum_{\beta=1}^{n} \frac{1}{2} (g_{\alpha\beta} + g_{\beta\alpha}) \dot{\gamma}^{(\beta)} \\ - (\mathbf{P}^{(\alpha)} : \mathscr{L} : \mathbf{D}) \Bigg] (\dot{\gamma}_*^{(\alpha)} - \dot{\gamma}^{(\alpha)}) \Bigg\} \\ + \varepsilon^2 \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta=1}^{n} g_{\alpha\beta} (\dot{\gamma}_*^{(\alpha)} - \dot{\gamma}^{(\alpha)}) (\dot{\gamma}_*^{(\beta)} - \dot{\gamma}^{(\beta)}).\end{aligned}$$

设想 $\{\dot{\gamma}^{(\alpha)}\}$ 是函数 Π_2 的极值点．因此有，

$$0 \leqslant \left[\sum_{\beta=1}^{n} \frac{1}{2} (g_{\alpha\beta} + g_{\beta\alpha}) \dot{\gamma}^{(\beta)} - \mathbf{P}^{(\alpha)} : \mathscr{L} : \mathbf{D} \right] (\dot{\gamma}_*^{(\alpha)} - \dot{\gamma}^{(\alpha)}). \tag{2.29}$$

由此得到：

$$\begin{cases} \sum\limits_{\beta=1}^{n} \frac{1}{2} (g_{\alpha\beta} + g_{\beta\alpha}) \dot{\gamma}^{(\beta)} - \mathbf{P}^{(\alpha)} : \mathscr{L} : \mathbf{D} = 0, & \dot{\gamma}^{(\alpha)} > 0, \\ \sum\limits_{\beta=1}^{n} \frac{1}{2} (g_{\alpha\beta} + g_{\beta\alpha}) \dot{\gamma}^{(\beta)} - \mathbf{P}^{(\alpha)} : \mathscr{L} : \mathbf{D} \geqslant 0, & \dot{\gamma}^{(\alpha)} = 0. \end{cases} \tag{2.30}$$

利用 (2.25) 式并且假定 $[h_{\alpha\beta}]$ 为对称矩阵，而 $\mathscr{L}$ 有以下的对称性

$$\mathscr{L}_{ijkl} = \mathscr{L}_{klij}.$$

(2.30) 式可改写为：

$$\begin{cases} \sum\limits_{\beta=1}^{n} h_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)} = \mathbf{P}^{(\alpha)} : \mathscr{L} : \mathbf{D}^e, & \dot{\gamma}^{(\alpha)} > 0, \\ \sum\limits_{\beta=1}^{n} h_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)} \geqslant \mathbf{P}^{(\alpha)} : \mathscr{L} : \mathbf{D}^e, & \dot{\gamma}^{(\alpha)} = 0, \end{cases} \tag{2.31}$$

注意到

$$\dot{\tau}^{(\alpha)} = \mathbf{P}^{(\alpha)} : \dot{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{P}^{(\alpha)} : \mathscr{L} : \mathbf{D}^e,$$

(2.31) 式即是硬化 (2.4) 式．

三、晶体塑性理论的极值原理

设想晶体占有体积 V. 在变形的某个瞬时，晶体内各点的位移场及应力场是已知的. 晶体外表面 S 分为两部分. 一部分表面 S_σ 上,给定了外力率 $\dot{p}_i$;而其余表面 S_u 上给定了速率 $\bar{V}_i$.

我们有如下边值问题:

平衡方程及边界条件:

$$\begin{cases}\dot{\sigma}_{ij,j}=0, & \text{在 } V \text{ 内},\\ \dot{\sigma}_{ij}n_j=\dot{p}_i, & \text{在 } S_\sigma \text{ 上},\\ V_i=\bar{V}_i, & \text{在 } S_u \text{ 上},\end{cases} \tag{3.1}$$

Cauchy 式:

$$D_{ij}=\frac{1}{2}(V_{i,j}+V_{j,i}), \tag{3.2}$$

本构方程:

$$\mathbf{D}=\mathscr{M}:\dot{\boldsymbol{\sigma}}+\sum_{\alpha=1}^{n}\mathbf{P}^{(\alpha)}\dot{\gamma}^{(\alpha)}, \tag{3.3}$$

硬化规律:

$$\begin{cases}\dot{\tau}^{(\alpha)}=\dot{\tau}_c^{(\alpha)}=\sum_{\beta=1}^{n}h_{\alpha\beta}\dot{\gamma}^{(\beta)}, & \dot{\gamma}^{(\alpha)}>0,\\ \dot{\tau}^{(\alpha)}\leqslant\dot{\tau}_c^{(\alpha)}=\sum_{\beta=1}^{n}h_{\alpha\beta}\dot{\gamma}^{(\beta)}, & \dot{\gamma}^{(\alpha)}=0,\\ \dot{\gamma}^{(\alpha)}\geqslant 0, & \alpha=1,2,\cdots,n.\end{cases} \tag{3.4}$$

(3.4) 式只对处于临界状态的滑移系适用. 对不处于临界状态的滑移系,滑移剪切率为零.

方程组 (3.1)—(3.4) 构成了晶体塑性理论的边值问题. 现在来讨论与此对应的极值原理.

Boyce 和 Prager[8] 首先讨论了刚塑性体,非耦合硬化情况下 ($h_{\alpha\beta}=0$, 当 $\alpha\neq\beta$) 的变分原理. Koiter[9] 则分析了一般弹塑性体，非耦合情况下的极值原理. Hill[10] 进一步提出了耦合硬化情况下,晶体塑性理论的极值原理.

为了比较方便起见,将简要列出 Hill[10] 业已论证的极值原理.

以速度场 V_i 为基本场量,一切满足 S_u 上速率边界条件的速率场 V_i^* 称为运动许可的速率场. 由速率场 V_i^* 直接导得应变率场 D_{ij}^*.

对于给定的 $\mathbf{D}^*$,由极小值问题 (2.27),可求得相应的剪切率 $\{\dot{\gamma}^{(\alpha)*}\}$,使本构方程及硬化公式得以满足.

我们有下述的最小速率势能原理:

在一切满足速率边界条件的运动许可的速率场中,真实的速率场,使速率势能 Φ_1 取极小值.

$$\Phi_1(V_i^*)=\frac{1}{2}\int_V\dot{\sigma}_{ij}^*D_{ij}^*dV-\int_{S_\sigma}\dot{p}_iV_i^*dS. \tag{3.5}$$

以应力率为基本场量. 设想静力许可的应力率场 $\dot{\sigma}_{ij}^*$ 必需满足体内平衡方程及 S_σ 上的给定的外力率边界条件. 对于给定的应力率 $\dot{\sigma}_{ij}^*$, 通过极小值问题 (2.7) 式可求得相应的剪切率 $\{\dot{\gamma}^{(\alpha)*}\}$,而相应的应变率张量 D_{ij}^* 为:

$$\mathbf{D}^* = \mathscr{M}:\dot{\boldsymbol{\sigma}}^* + \sum_{\alpha=1}^{n} \mathbf{P}^{(\alpha)}\dot{\gamma}^{(\alpha)*}.$$

此时,有下述最小应力率余能原理:

在一切静力许可的应力率场中,真实的应力率场,使应力率余能 Φ_2 取极小:

$$\Phi_2(\dot{\sigma}_{ij}^*) = \frac{1}{2}\int_V \dot{\sigma}_{ij}^* D_{ij}^* dV - \int_{S_u} \dot{p}_i^* \bar{V}_i^* dS. \tag{3.6}$$

极值原理 (3.5), (3.6) 式均是在假定硬化矩阵 $[h_{\alpha\beta}]$ 为对称正定矩阵,而弹性模量张量 $\mathscr{L}_{ijkl}$ 具有如下对称性时,

$$\mathscr{L}_{ijkl} = \mathscr{L}_{klij}$$

得到了证明.

在论述下一节新的极值原理时,我们也采用这些假定.

四、极值原理的新形式

以上讨论的极值原理,均是通过本构方程及硬化规律求得剪切率 $\{\dot{\gamma}^{(\alpha)}\}$. 因此, $\{\dot{\gamma}^{(\alpha)}\}$ 并不是独立变量. 如果将 $\{\dot{\gamma}^{(\alpha)}\}$ 也作为独立变量,那么,不难证明下述极值原理.

在一切满足速率边界条件的运动许可的速率场 V_i^* 及一切满足约束条件 $\dot{\gamma}^{(\alpha)*} \geqslant 0$ 的剪切率场 $\{\dot{\gamma}^{(\alpha)*}\}$ 中,真实的速率场 V_i 和剪切率场 $\{\dot{\gamma}^{(\alpha)}\}$,使下述泛函取极小值:

$$\Phi(V_i^*, \dot{\gamma}^{(\alpha)*}) = \frac{1}{2}\int_V \mathbf{D}^{e*}:\mathscr{L}:\mathbf{D}^{e*} dV + \frac{1}{2}\int_V \sum_{\alpha,\beta=1}^{n} h_{\alpha\beta}\dot{\gamma}^{(\alpha)*}\dot{\gamma}^{(\beta)*} dV - \int_{S_\sigma} \dot{p}_i V_i^* dS, \tag{4.1}$$

其中

$$\mathbf{D}^{e*} = \mathbf{D}^* - \sum_{\alpha=1}^{n} \mathbf{P}^{(\alpha)}\dot{\gamma}^{(\alpha)}. \tag{4.2}$$

对于任意的实数 ε, $\delta(0 \leqslant \varepsilon \leqslant 1)$, 下述速率场 $\tilde{V}_i$ 及剪切率场 $\{\tilde{\dot{\gamma}}^{(\alpha)}\}$ 是运动许可的:

$$\begin{cases} \tilde{V}_i = V_i + \delta(V_i^* - V_i), \\ \tilde{\dot{\gamma}}^{(\alpha)} = \dot{\gamma}^{(\alpha)} + \varepsilon(\dot{\gamma}^{(\alpha)*} - \dot{\gamma}^{(\alpha)}). \end{cases} \tag{4.3}$$

此时有:

$$\begin{aligned} \Phi(\tilde{V}_i, \tilde{\dot{\gamma}}^{(\alpha)}) = {} & \Phi(V_i, \dot{\gamma}^{(\alpha)}) + \frac{1}{2}\int_V \Delta\mathbf{D}^e:\mathscr{L}:\mathbf{D}^e dV \\ & + \frac{1}{2}\int_V \mathbf{D}^e:\mathscr{L}:\Delta\mathbf{D}^e dV + \frac{1}{2}\int_V \Delta\mathbf{D}^e:\mathscr{L}:\Delta\mathbf{D}^e dV \\ & + \frac{1}{2}\varepsilon\int_V \sum_{\alpha,\beta=1}^{n} [h_{\alpha\beta}\dot{\gamma}^{(\alpha)}(\dot{\gamma}^{(\beta)*} - \dot{\gamma}^{(\beta)}) + h_{\alpha\beta}(\dot{\gamma}^{(\alpha)*} - \dot{\gamma}^{(\alpha)})\dot{\gamma}^{(\beta)}] dV \\ & + \frac{1}{2}\varepsilon^2\int_V \sum_{\alpha,\beta=1}^{n} h_{\alpha\beta}(\dot{\gamma}^{(\alpha)*} - \dot{\gamma}^{(\alpha)})(\dot{\gamma}^{(\beta)*} - \dot{\gamma}^{(\beta)}) dV \end{aligned}$$

$$-\delta\int_{S_\sigma}\dot{\bar{p}}_i(V_i^*-V_i)dS, \tag{4.4}$$

注意到

$$\Delta\mathbf{D}^e=\mathbf{D}^e-\mathbf{D}^e=\mathbf{D}-\sum_{\alpha=1}^{n}\mathbf{P}^{(\alpha)}\tilde{\dot{\gamma}}^{(\alpha)}$$

$$-\left(\mathbf{D}-\sum_{\alpha=1}^{n}\mathbf{P}^{(\alpha)}\dot{\gamma}^{(\alpha)}\right)=\mathbf{D}-\mathbf{D}-\varepsilon\sum_{\alpha=1}^{n}\mathbf{P}^{(\alpha)}(\dot{\gamma}^{(\alpha)*}-\dot{\gamma}^{(\alpha)}).$$

设想弹性模量张量 $\mathscr{L}$ 具有如下对称性:

$$\mathscr{L}_{ijkl}=\mathscr{L}_{klij},$$

而硬化系数矩阵 $[h_{\alpha\beta}]$ 是对称正定矩阵. 此时 (4.4) 式可化为:

$$\begin{aligned}
\Phi(\tilde{V}_i,\tilde{\dot{\gamma}}^{(\alpha)})&=\Phi(V_i,\dot{\gamma}^{(\alpha)})+\int_V\dot{\boldsymbol{\sigma}}:\Delta\mathbf{D}^e dV\\
&\quad+\frac{1}{2}\int_V\Delta\mathbf{D}^e:\mathscr{L}:\Delta\mathbf{D}^e dV+\varepsilon\int_V\sum_{\alpha,\beta=1}^{n}h_{\alpha\beta}\dot{\gamma}^{(\beta)}(\dot{\gamma}^{(\alpha)*}-\dot{\gamma}^{(\alpha)})dV\\
&\quad+\frac{1}{2}\varepsilon^2\int_V\sum_{\alpha,\beta=1}^{n}h_{\alpha\beta}(\dot{\gamma}^{(\alpha)*}-\dot{\gamma}^{(\alpha)})(\dot{\gamma}^{(\beta)*}-\dot{\gamma}^{(\beta)})dV\\
&\quad-\delta\int_{S_\sigma}\dot{\bar{p}}_i(V_i^*-V_i)dS\\
&=\Phi(V_i,\dot{\gamma}^{(\alpha)})+\frac{1}{2}\int_V\Delta\mathbf{D}^e:\mathscr{L}:\Delta\mathbf{D}^e dV\\
&\quad+\frac{1}{2}\varepsilon^2\int_V\sum_{\alpha,\beta=1}^{n}h_{\alpha\beta}(\dot{\gamma}^{(\alpha)*}-\dot{\gamma}^{(\alpha)})(\dot{\gamma}^{(\beta)*}-\dot{\gamma}^{(\beta)})dV\\
&\quad+\varepsilon\int_V\sum_{\alpha=1}^{n}\left[\sum_{\beta=1}^{n}h_{\alpha\beta}\dot{\gamma}^{(\beta)}-\dot{\tau}^{(\alpha)}\right](\dot{\gamma}^{(\alpha)*}-\dot{\gamma}^{(\alpha)})dV.
\end{aligned} \tag{4.5}$$

鉴于真实的速率场 V_i 及剪切率场 $\{\dot{\gamma}^{(\alpha)}\}$ 所对应的应力率场 $\dot{\boldsymbol{\sigma}}$，满足平衡方程、本构方程和硬化规律. 因此，(4.5) 式右端第四项是非负的. 这就导致

$$\Phi(\tilde{V}_i,\tilde{\dot{\gamma}}^{(\alpha)})\geqslant\Phi(V_i,\dot{\gamma}^{(\alpha)}).$$

上述极值原理是以速率场 V_i 及剪切率场 $\{\dot{\gamma}^{(\alpha)}\}$，为基本未知量的广义极值原理. 下面我们讨论以应力率场及剪切率场 $\{\dot{\gamma}^{(\alpha)}\}$ 为基本未知量的广义极值原理.

设想静力许可的应力率场 $\tilde{\dot{\sigma}}_{ij}$，必需满足体内平衡方程及 S_σ 上的给定的外力率边界条件. 对于剪切率场 $\{\tilde{\dot{\gamma}}^{(\alpha)}\}$ 除了约束条件 $\tilde{\dot{\gamma}}^{(\alpha)}\geqslant 0$ 之外，还需满足下述硬化约束条件:

$$\tilde{\dot{\sigma}}^{(\alpha)}-\sum_{\beta\in A}h_{\alpha\beta}\tilde{\dot{\gamma}}^{(\beta)}\leqslant 0,\quad \forall\alpha\in A. \tag{4.6}$$

这里，A 是满足下述条件的所有正整数 α 的集合， $A:=\{\alpha,\ \tau^{(\alpha)}=\tau_C^{(\alpha)}\}$，也就是说对所有处于临界状态的滑移系 α 有:

$$\begin{cases}\tilde{\dot{\gamma}}^{(\alpha)}\geqslant 0, & \forall\alpha\in A,\\ \tilde{\dot{\sigma}}^{(\alpha)}-\sum\limits_{\beta\in A}h_{\alpha\beta}\tilde{\dot{\gamma}}^{(\beta)}\leqslant 0.\end{cases} \tag{4.7}$$

我们称一切满足 (4.7) 式的剪切率场 $\{\tilde{\dot{\gamma}}^{(\alpha)}\}$ 为硬化许可的剪切率场.

我们有下述广义的极值原理：在所有静力许可的应力率场 $\tilde{\dot{\sigma}}_{ij}$ 及所有硬化许可的剪切率

场 $\{\tilde{\dot{\gamma}}^{(\alpha)}\}$中，真实的应力率场 $\dot{\sigma}_{ij}$ 及剪切率场 $\{\dot{\gamma}^{(\alpha)}\}$使下式取极小：

$$\Phi_0=\frac{1}{2}\int_V \tilde{\dot{\sigma}}:\mathscr{L}:\tilde{\dot{\sigma}}dV+\frac{1}{2}\int_V\sum_{\alpha,\beta\in A}h_{\alpha\beta}\tilde{\dot{\gamma}}^{(\alpha)}\tilde{\dot{\gamma}}^{(\beta)}dV-\int_{S_u}\tilde{\dot{p}}_i\bar{V}_i dS. \tag{4.8}$$

令 $$\tilde{\dot{\sigma}}_{ij}=\dot{\sigma}_{ij}+\Delta\dot{\sigma}_{ij},\quad \tilde{\dot{\gamma}}^{(\alpha)}=\dot{\gamma}^{(\alpha)}+\Delta\dot{\gamma}^{(\alpha)},$$

则有：

$$\begin{aligned}\Delta\Phi_0&=\Phi_0(\tilde{\dot{\sigma}},\tilde{\dot{\gamma}}^{(\alpha)})-\Phi_0(\dot{\sigma},\dot{\gamma}^{(\alpha)})\\&=\int_V\mathscr{L}_{ijkl}\dot{\sigma}_{kl}\Delta\dot{\sigma}_{ij}dV+\int_V\sum_{\alpha\in A}\Big(\sum_{\beta\in A}h_{\alpha\beta}\Delta\dot{\gamma}^{(\beta)}\Big)\dot{\gamma}^{(\alpha)}dV\\&\quad-\int_{S_u}\Delta\dot{p}_i\bar{V}_i dS+\frac{1}{2}\int_V\mathscr{L}_{ijkl}\Delta\dot{\sigma}_{ij}\Delta\dot{\sigma}_{kl}dV\\&\quad+\frac{1}{2}\int_V\sum_{\alpha,\beta\in A}h_{\alpha\beta}\Delta\dot{\gamma}^{(\alpha)}\Delta\dot{\gamma}^{(\beta)}dV\\&=\int_V(D_{ij}-D_{ij}^p)\Delta\dot{\sigma}_{ij}dV+\int_V\sum_{\alpha\in A}(\tilde{\dot{\tau}}_c^{(\alpha)}-\dot{\tau}_c^{(\alpha)})\dot{\gamma}^{(\alpha)}dV\\&\quad-\int_V\Delta\dot{p}_i\bar{V}_i dS+\frac{1}{2}\int_V\mathscr{L}_{ijkl}\Delta\dot{\sigma}_{ij}\Delta\dot{\sigma}_{kl}dV+\frac{1}{2}\int_V\sum_{\alpha,\beta\in A}h_{\alpha\beta}\Delta\dot{\gamma}^{(\alpha)}\Delta\dot{\gamma}^{(\beta)}dV.\end{aligned}\tag{4.9}$$

显然，(4.9)式的最后两项是非负的．而前三项又可化为：

$$\begin{aligned}&-\int_V\sum_{\alpha\in A}(p_{ij}^{(\alpha)}\dot{\gamma}^{(\alpha)})\Delta\dot{\sigma}_{ij}dV+\int_V\sum_{\alpha\in A}(\tilde{\dot{\sigma}}_c^{(\alpha)}-\dot{\tau}_c^{(\alpha)})\dot{\gamma}^{(\alpha)}dV\\&=\int_V\sum_{\alpha\in A}(\tilde{\dot{\sigma}}_c^{(\alpha)}-\tilde{\dot{\sigma}}^{(\alpha)})\dot{\gamma}^{(\alpha)}dV-\int_V\sum_{\alpha\in A}(\dot{\tau}_c^{(\alpha)}-\dot{\tau}^{(\alpha)})\dot{\gamma}^{(\alpha)}dV\\&=\int_V\sum_{\alpha\in A}(\tilde{\dot{\sigma}}_c^{(\alpha)}-\tilde{\dot{\sigma}}^{(\alpha)})\dot{\gamma}^{(\alpha)}dV\geqslant 0.\end{aligned}$$

由此，我们证实了极小值性质：

$$\Delta\Phi_0\geqslant 0. \tag{4.10}$$

(4.10)式中等号只当

$$\Delta\dot{\sigma}_{ij}=\Delta\dot{\gamma}^{(\alpha)}=0$$

时成立．这也就说明泛函 Φ_0 的极小值问题的解是唯一的．

参　考　文　献

[1] Taylor, G. I., *J. Inst. Metals*, **62**(1938), 307.
[2] Hill, R., *J. Mech. Phys. Solids*, **13**(1965), 89—101.
[3] Rice, J., *J. Mech. Phys. Solids*, **19**(1971), 433—455.
[4] Asaro, R. J., *J. Appl. Mech.*, **50**(1983), 921—934.
[5] Kocks, U. F., *Metall. Trans.*, **1**(1970), 1121—1142.
[6] Bishop, J. F. W. and Hill, R., *Philos. Mag.*, **42**(1951), 414—427.
[7] 蔡宣三，最优化与最优控制，清华大学出版社．
[8] Boyce, W. E. and Prager, W., *J. Mech. Phys. Solids*, **6**(1957), 9.
[9] Koiter, W., *Progress in Solid Mechanics*, North Holland, **1**(1960).
[10] Hill, R., *J. Mech. Phys. Solids*, **14**(1966), 95—102.