

Физическое материаловедение

Научная статья

УДК 539.21

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.16412>

СРАВНЕНИЕ ПОДХОДОВ К УЧЕТУ НЕИДЕАЛЬНЫХ КОНТАКТОВ ПРИ ОПРЕДЕЛЕНИИ ЭФФЕКТИВНОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ МАТЕРИАЛА

К. П. Фролова ✉, Е. Н. Вильчевская

Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, Россия

✉ fkp@ipme.ru

Аннотация. В работе развивается комплексный подход к учету неидеальных контактов (НК), появление которых вызвано разнообразными факторами (особенности микроструктуры, специфика процесса на мезоуровне и т. п.), при определении эффективных свойств материала различной природы, представляемых тензорами второго ранга. Макроскопические свойства определяются путем решения задачи гомогенизации для материала, состоящего из матрицы и изолированных эллипсоидальных неоднородностей, на границе которых поля не являются непрерывными. Рассмотрены, обобщены и сопоставлены существующие подходы к учету НК: подход, при котором НК моделируют, вводя скачок поля на границе раздела фаз через задаваемое отношение значений поля по обе стороны границы, а также подход, при котором в рассмотрение вводится неоднородность с поверхностным эффектом. С целью учета НК при нахождении эффективных свойств материала, рассматривается эквивалентная неоднородность с идеальными контактами на границе, вклад которой в макроскопическое свойство эквивалентен вкладу исходной неоднородности. В качестве примера решена задача об определении эффективной диффузионной проницаемости материала.

Ключевые слова: эффективные свойства, неидеальный контакт, эквивалентная неоднородность, эффективная диффузионная проницаемость, задача гомогенизации

Финансирование: Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда, грант № 23-79-01133 (<https://rscf.ru/project/23-79-01133/>).

Для цитирования: Фролова К. П., Вильчевская Е. Н. Сравнение подходов к учету неидеальных контактов при определении эффективной проницаемости материала // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 4. С. 146–159. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.16412>

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

Original article

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.16412>

COMPARISON OF APPROACHES TO ACCOUNTING FOR IMPERFECT CONTACTS WHEN DETERMINING THE EFFECTIVE PERMEABILITY OF MATERIAL

K. P. Frolova ✉, E. N. Vilchevskaya

Institute for Problems of Mechanical Engineering, RAS, St. Petersburg, Russia

✉ fkp@ipme.ru



Abstract. The paper develops a complex approach to accounting for imperfect contacts (IC) when determining effective properties of various nature. The IC are assumed to be caused by various factors (microstructure features, process's specificity and so on). To obtain macroscopic properties, we seek a solution of the homogenization problem for the material containing isolated ellipsoidal inhomogeneities when fields are discontinuous at the interphase boundaries. The paper considers, generalizes and compares two existing approaches to accounting for the IC, namely, an approach where IC is modeled by means of a field jump specified in terms of a ratio of field values on the outer and inner sides of the inhomogeneity boundary, and approach, which introduces inhomogeneity with a surface effect. To take into account IC, we have considered an equivalent inhomogeneity with ideal contacts at the boundary. Working the problem on determining the effective diffusional permeability of material provided an example.

Keywords: effective properties, imperfect contact, equivalent inhomogeneity, effective diffusional permeability, homogenization problem

Funding: The reported study was funded by Russian Science Foundation, Grant No. 23-79-01133 (<https://rscf.ru/project/23-79-01133/>).

For citation: Frolova K. P., Vilchevskaya E. N., Comparison of approaches to accounting for imperfect contacts when determining the effective permeability of material, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (4) (2023) 146–159. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.16412>

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

Введение

Свойства материала, неоднородного на микроуровне, непосредственно зависят от его структуры и могут быть определены в рамках континуальной теории с помощью методов гомогенизации. При этом в рассмотрение вводятся физические поля, которые, как правило, полагаются непрерывными на границах раздела фаз. С физической точки зрения это означает наличие «идеальных» контактов на внутренних границах. В то же время, при описании ряда явлений необходимо учитывать наличие неидеальных контактов, которые могут возникать как из-за особенностей микроструктуры материала, так и в связи со спецификой описываемого процесса [1 – 4].

Как правило, вопросы учета неидеальных контактов при определении эффективных свойств рассматриваются в литературе обособленно, в контексте описания процессов, разных по природе. Так, некоторые авторы обратили внимание на необходимость учета явления сегрегации при определении эффективных коэффициентов диффузии. Под этим явлением подразумевается оседание примеси в дефектах структуры, характерное для массопереноса [2, 5 – 8]. Такой учет реализовывался посредством введения скачка концентрации через отношение концентраций с внешней и внутренней сторон границы раздела фаз (параметр сегрегации). С применением этого подхода авторы статьи [2] получили границы Фойгта – Рейсса и Хашина – Штрикмана для эффективной подвижности примеси, выразив диффузионный поток через градиент химического потенциала (потенциал полагали непрерывным), после чего определили непосредственно эффективные коэффициенты диффузии. В статьях [5, 6] постоянный параметр сегрегации был введен в уравнения модифицированного метода эффективной среды. В работах [7, 8] указанный параметр был введен в уравнения методов эффективного поля.

Отдельно в литературе рассматривались подходы к учету неидеальных контактов при определении эффективной тепло- или электропроводности микрогетерогенного материала [9 – 12]. Полагали, что такие контакты появляются вследствие наличия поверхностных дефектов (шероховатости, отслоения и т. п.). Моделирование неидеальных контактов осуществлялось через рассмотрение неоднородностей с поверхностным эффектом (предполагали, что такие неоднородности покрыты слоем с экстремальными свойствами, толщина которого стремится к нулю). Поверхностный эффект учитывали, либо определяя величины скачка поля из решения задачи об изолированной неоднородности в бесконечной матрице [9], либо аппроксимируя выражения для тензоров концентрации, связывающих

средние поля внутри неоднородности с приложенным полем [10 – 12].

Подобие уравнений диффузии, тепло- и электропроводности позволяет сделать предположение о возможности разработки единого подхода к моделированию неидеальных контактов, вызванных разнообразными факторами, при определении для материала эффективных свойств различной природы. В статье [13] мы обобщили подходы, представленные в литературе, и провели их сравнение на примере нахождения эффективного коэффициента диффузии примеси в материале со сферическими неоднородностями.

Целью настоящей работы является дальнейшее обобщение и сравнение имеющихся подходов для случаев материала со сфероидальными и эллипсоидальными неоднородностями.

Постановка задачи гомогенизации

Эффективные свойства материала находятся через решение задачи гомогенизации для репрезентативного объема V , представляющего собой частицу сплошной среды на макроуровне. Эффективные свойства выражаются с помощью тензорных величин, связывающих между собой поля, средние по репрезентативному объему. Как правило, предполагают, что гомогенизированный материал удовлетворяет простейшим линейным определяющим соотношениям. В силу подобия уравнений диффузии, тепло- и электропроводности ограничимся далее рассмотрением задачи диффузии, для которой справедлив закон Фика:

$$\langle \mathbf{J} \rangle_V = -\mathbf{D}^{eff} \cdot \langle \nabla c \rangle_V, \quad (1)$$

где \mathbf{D}^{eff} – эффективный тензор диффузионной проницаемости (тензор диффузии примеси в гомогенизированном материале), \mathbf{J} – диффузионный поток, c – концентрация, ∇ – набла-оператор, $\langle \dots \rangle_V = (1/V) \int_V (\dots) dV$.

Для нахождения полей, подлежащих осреднению, решается стационарная задача диффузии. Закон сохранения в отсутствие внутренних источников/стоков имеет следующий вид:

$$\nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{x}) = 0, \quad (2)$$

где \mathbf{x} – радиус-вектор точки внутри объема V .

Поток и градиент концентрации в каждой точке репрезентативного объема связываются линейным определяющим соотношением:

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}) = -\mathbf{D}(\mathbf{x}) \cdot \nabla c(\mathbf{x}), \quad (3)$$

где $\mathbf{D}(\mathbf{x})$ – тензор диффузионной проницаемости материала в точке \mathbf{x} .

Независимость эффективных свойств от условий на границе Σ репрезентативного объема допускает произвольность их выбора. Удобно задавать однородное условие Хилла, которое в случае задачи диффузии имеет вид $c(\mathbf{x})|_{\Sigma} = \mathbf{G}_0 \cdot \mathbf{x}$. Тогда среднее значение градиента концентрации полностью определяется граничным условием [14]:

$$\langle \nabla c \rangle_V = \mathbf{G}_0. \quad (4)$$

Наличие границ внутри объема V (границ Γ раздела фаз) требует задания дополнительных граничных условий. Эти условия будут разными в зависимости от способа учета неидеальных контактов.

Рассмотрим далее материал, состоящий из изотропной матрицы, характеризующейся тензором диффузионной проницаемости $\mathbf{D}_0 = D_0 \mathbf{I}$ (\mathbf{I} – единичный тензор), и неоднородностей эллипсоидальной формы объемом V_1 с проницаемостью $\mathbf{D}_1 = D_1 \mathbf{I}$, и приведем условия на границах раздела фаз.

Одним из простейших, известных из литературы способов учета неидеального контакта является введение скачка поля на границе раздела матрица (+) / неоднородность (–) через постоянное отношение значений поля с внешней и внутренней сторон границы. В контексте задачи диффузии скачок может испытывать либо поле концентрации, либо нормальная компонента потока. В первом случае на границе раздела фаз Γ с внешней



нормалью \mathbf{n}_Γ справедливы следующие условия:

$$D_0 \frac{\partial c(\mathbf{x})}{\partial n_\Gamma} \Big|_{\mathbf{x} \rightarrow \Gamma^+} = D_1 \frac{\partial c(\mathbf{x})}{\partial n_\Gamma} \Big|_{\mathbf{x} \rightarrow \Gamma^-}, \quad c(\mathbf{x}) \Big|_{\mathbf{x} \rightarrow \Gamma^+} = s_c c(\mathbf{x}) \Big|_{\mathbf{x} \rightarrow \Gamma^-}, \quad (5)$$

где s_c – параметр сегрегации.

Скачок выражается как $[c] = (s_c - 1)c(\mathbf{x}) \Big|_{\mathbf{x} \rightarrow \Gamma^-}$.

При наличии скачка нормальной компоненты потока J_n , можно задать следующие условия, введя в рассмотрение параметр сегрегации s_f :

$$D_0 \frac{\partial c(\mathbf{x})}{\partial n_\Gamma} \Big|_{\mathbf{x} \rightarrow \Gamma^+} = s_f D_1 \frac{\partial c(\mathbf{x})}{\partial n_\Gamma} \Big|_{\mathbf{x} \rightarrow \Gamma^-}, \quad c(\mathbf{x}) \Big|_{\mathbf{x} \rightarrow \Gamma^+} = c(\mathbf{x}) \Big|_{\mathbf{x} \rightarrow \Gamma^-}. \quad (6)$$

Скачок в этом случае определяется как $[J_n] = (s_f - 1)\mathbf{n}_\Gamma \cdot \mathbf{J}(\mathbf{x}) \Big|_{\mathbf{x} \rightarrow \Gamma^-}$.

Другой способ учета неидеального контакта используется при рассмотрении неоднородностей с поверхностным эффектом. В общем случае в матрицу помещают неоднородности, представляющие собой конфокальные эллипсоиды, для которых проводимость внутреннего эллипсоида $\mathbf{D}_1 = D_1 \mathbf{I}$, а проводимость внешнего слоя $\mathbf{D}_s = D_s \mathbf{I}$.

Главные полуоси внешнего эллипсоида b_1, b_2, b_3 и внутреннего эллипсоида a_1, a_2, a_3 связаны следующим соотношением:

$$b_i^2 = a_i^2 + \xi,$$

где $i = 1, 2, 3$; ξ – константа.

На внутренних границах Γ_a внутреннего эллипсоида объемом V_a с внешней нормалью \mathbf{n}_{Γ_a} и Γ_b внешнего эллипсоида объемом V_b с внешней нормалью \mathbf{n}_{Γ_b} имеют место идеальные контакты:

$$\begin{aligned} D_0 \frac{\partial c(\mathbf{x})}{\partial n_{\Gamma_b}} \Big|_{\mathbf{x} \rightarrow \Gamma_b^+} &= D_s \frac{\partial c(\mathbf{x})}{\partial n_{\Gamma_b}} \Big|_{\mathbf{x} \rightarrow \Gamma_b^-}, \quad c(\mathbf{x}) \Big|_{\mathbf{x} \rightarrow \Gamma_b^+} = c(\mathbf{x}) \Big|_{\mathbf{x} \rightarrow \Gamma_b^-}, \\ D_s \frac{\partial c(\mathbf{x})}{\partial n_{\Gamma_a}} \Big|_{\mathbf{x} \rightarrow \Gamma_a^+} &= D_1 \frac{\partial c(\mathbf{x})}{\partial n_{\Gamma_a}} \Big|_{\mathbf{x} \rightarrow \Gamma_a^-}, \quad c(\mathbf{x}) \Big|_{\mathbf{x} \rightarrow \Gamma_a^+} = c(\mathbf{x}) \Big|_{\mathbf{x} \rightarrow \Gamma_a^-}. \end{aligned} \quad (7)$$

Для учета поверхностного эффекта необходимо перейти к пределу при $\xi \rightarrow 0$, а также (в контексте задачи диффузии) либо при $D_s \rightarrow 0$, либо при $D_s \rightarrow \infty$. В первом случае, соответствующем изолирующему покрытию, в рассмотрение удобно ввести эквивалентную поверхностную сопротивляемость

$$\beta = \frac{V_s}{D_s S_a} = \frac{4\pi(a_1^2 a_2^2 + a_1^2 a_3^2 + a_2^2 a_3^2)}{6a_1 a_2 a_3 S_a} \lim_{\xi \rightarrow 0, D_s \rightarrow 0} \frac{\xi}{D_s}, \quad (8)$$

где $V_s = \lim_{\xi \rightarrow 0} V_b - V_a$, S_a – площадь поверхности неоднородности объемом V_a .

Во втором случае, соответствующем проводящему покрытию, удобно ввести эквивалентную поверхностную проницаемость

$$\lambda = \frac{D_s V_s}{S_a} = \frac{4\pi(a_1^2 a_2^2 + a_1^2 a_3^2 + a_2^2 a_3^2)}{6a_1 a_2 a_3 S_a} \lim_{\xi \rightarrow 0, D_s \rightarrow \infty} \xi D_s. \quad (9)$$

Неоднородность с неидеальными контактами можно формально заменить эквивалентной неоднородностью с идеальными контактами, влияющей на эффективные свойства так же, как и исходная. Для осуществления такой замены необходимо определить, какими

свойствами \mathbf{D}^* должна обладать эквивалентная неоднородность. Эти свойства будут разными в зависимости от способа учета неидеального контакта.

Введение в рассмотрение эквивалентной неоднородности обладает тем преимуществом, что появляется возможность использовать существующие методы гомогенизации, разработанные в предположении о непрерывности полей на реальной границе раздела фаз. В этом случае достаточно подставить соответствующие коэффициенты диффузии примеси внутри неоднородности в выражения, известные из литературы. Поскольку, таким образом, наличие неидеальных контактов достаточно учесть на этапе определения диффузионной проницаемости эквивалентной неоднородности, ограничимся в рамках данной работы качественным и количественным анализами выражений для \mathbf{D}^* .

Отметим, что неидеальный контакт, моделируемый через задание скачка концентрации либо посредством рассмотрения неоднородности с *изолирующим* покрытием, может иметь место при скоплении примеси на границе раздела фаз. Неидеальный же контакт, который моделируется через задание другого скачка, а именно – нормальной компоненты протока, либо посредством рассмотрения неоднородности с *проводящим* покрытием, может существовать при образовании дополнительных путей диффузии по границе раздела фаз.

В связи с этим для каждого из указанных случаев представляет интерес сравнить между собой два подхода к моделированию неидеальных контактов:

- посредством задания скачка поля через параметр сегрегации;
- через рассмотрение неоднородности с поверхностным эффектом.

Эффективное свойство можно выразить как функцию различных микроструктурных параметров. В настоящей статье использован подход, разработанный И. Севостьяновым и М. Качановым [14], согласно которому роль микроструктурного параметра играет сумма тензоров вклада неоднородностей. Приведем далее выражения для этих тензоров при наличии в материале неидеальных контактов, моделируемых с помощью рассмотренных выше подходов.

Тензоры вклада

При определении тензоров вклада неоднородности считаются изолированными. Если на границе репрезентативного объема задана концентрация, то средний по репрезентативному объему градиент c полностью определен, тогда как средний поток зависит от микроструктуры; его можно представить в виде суммы

$$\langle \mathbf{J} \rangle_V = -\mathbf{D}_0 \cdot \mathbf{G}_0 + \Delta \mathbf{J}, \quad (10)$$

где $\Delta \mathbf{J}$ – дополнительный поток, вызванный присутствием неоднородности.

Такой дополнительный поток есть линейная функция от приложенного поля [13]:

$$\Delta \mathbf{J} = -\frac{V_1}{V} \mathbf{H}^D \cdot \mathbf{G}_0, \quad (11)$$

где \mathbf{H}^D – тензор вклада неоднородности в диффузионную проницаемость.

Тензор вклада можно найти через решение задачи Эшелби для диффузии. Последняя имеет аналитическое решение только для эллипсоидальной неоднородности. В этом случае тензор вклада можно выразить через тензор концентрации, линейно связывающий поле внутри неоднородности с приложенным полем.

Таким образом, для нахождения тензора вклада необходимо решить задачу об осреднении полей и найти тензор концентрации. При этом наличие неидеальных контактов следует учитывать на обоих этапах.

Далее будет представлено краткое описание обоих этапов.

Осреднение полей

Определим средние поля в случае идеальных контактов на границе раздела матрица/неоднородность, что в рамках данной работы соответствует материалу с эквивалентной неоднородностью, а также при моделировании неидеальных контактов различными способами.

Согласно теореме Остроградского – Гаусса,



$$\langle \nabla c \rangle_V = \frac{1}{V} \int_{\Sigma} \mathbf{n}_{\Sigma} c(\mathbf{x}) d\Sigma, \quad \langle \mathbf{J} \rangle_V = \frac{1}{V} \int_{\Sigma} \mathbf{n}_{\Sigma} \cdot \mathbf{J}(\mathbf{x}) \mathbf{x} d\Sigma, \quad (12)$$

где \mathbf{n}_{Σ} – внешняя нормаль к поверхности Σ репрезентативного объема V .

Выражения (12) удобно переписать с учетом границ раздела фаз; при этом следует добавить и вычесть соответствующие поверхностные интегралы. Тогда при идеальных контактах на границе неоднородности объемом V_1 получим известные формулы:

$$\langle \nabla c \rangle_V = \left(1 - \frac{V_1}{V}\right) \langle \nabla c \rangle_{V_0} + \frac{V_1}{V} \langle \nabla c \rangle_{V_1}, \quad \langle \mathbf{J} \rangle_V = \left(1 - \frac{V_1}{V}\right) \langle \mathbf{J} \rangle_{V_0} + \frac{V_1}{V} \langle \mathbf{J} \rangle_{V_1}, \quad (13)$$

где $\langle \dots \rangle_{V_0} = (1/V_0) \int_{V_0} (\dots) dV_0$, $\langle \dots \rangle_{V_1} = (1/V_1) \int_{V_1} (\dots) dV_1$.

Случай материала с неоднородностью с покрытием конечной толщины, которое характеризуется конечными свойствами, является частным случаем трехфазного материала, на внутренних границах которого имеются идеальные контакты.

Средние поля в таком случае следуют выражениям

$$\begin{aligned} \langle \nabla c \rangle_V &= \left(1 - \frac{V_b}{V}\right) \langle \nabla c \rangle_{V_0} + \frac{V_a}{V} \langle \nabla c \rangle_{V_a} + \frac{V_s}{V} \langle \nabla c \rangle_{V_s}, \\ \langle \mathbf{J} \rangle_V &= \left(1 - \frac{V_b}{V}\right) \langle \mathbf{J} \rangle_{V_0} + \frac{V_a}{V} \langle \mathbf{J} \rangle_{V_a} + \frac{V_s}{V} \langle \mathbf{J} \rangle_{V_s}, \end{aligned} \quad (14)$$

где $\langle \dots \rangle_{V_a} = (1/V_a) \int_{V_a} (\dots) dV_a$ и $\langle \dots \rangle_{V_s} = (1/V_s) \int_{V_s} (\dots) dV_s$.

При наличии скачка концентрации на границе раздела фаз, средний градиент концентрации должен определяться следующим образом [6]:

$$\langle \nabla c \rangle_V = \left(1 - \frac{V_1}{V}\right) \langle \nabla c \rangle_{V_0} + \frac{V_1}{V} \langle \nabla c \rangle_{V_1} + \frac{1}{V} \int_{\Gamma} \mathbf{n}_{\Gamma} [c] d\Gamma, \quad (15)$$

тогда как средний поток вычисляется по формуле (13).

Если задавать скачок концентрации через параметр сегрегации при условии (5), то формулу (15) удобно переписать в следующем виде:

$$\langle \nabla c \rangle_V = \left(1 - \frac{V_1}{V}\right) \langle \nabla c \rangle_{V_0} + s_c \frac{V_1}{V} \langle \nabla c \rangle_{V_1}. \quad (16)$$

Наличие скачка нормальной компоненты потока приводит к необходимости использования следующей формулы для среднего потока [6]:

$$\langle \mathbf{J} \rangle_V = \left(1 - \frac{V_1}{V}\right) \langle \mathbf{J} \rangle_{V_0} + \frac{V_1}{V} \langle \mathbf{J} \rangle_{V_1} + \frac{1}{V} \int_{\Gamma} [J_n] \mathbf{x} d\Gamma, \quad (17)$$

при этом средний градиент концентрации определяется по формуле (13).

В частном случае, когда скачок нормальной компоненты потока задан в соответствии с условием (6), средний поток определяется выражением

$$\langle \mathbf{J} \rangle_V = \left(1 - \frac{V_1}{V}\right) \langle \mathbf{J} \rangle_{V_0} + s_f \frac{V_1}{V} \langle \mathbf{J} \rangle_{V_1}. \quad (18)$$

Выражая $\langle \nabla c \rangle_{V_0}$ через \mathbf{G}_0 , получим следующие представления для среднего потока: для материала с эквивалентной неоднородностью –

$$\langle \mathbf{J} \rangle_V = -\mathbf{D}_0 \cdot \mathbf{G}_0 - \frac{V_1}{V} (\mathbf{D}^* - \mathbf{D}_0) \cdot \langle \nabla c \rangle_{V_1}, \quad (19)$$

для материала с неоднородностью и покрытием конечной толщины (характеризуемого конечными свойствами) –

$$\langle \mathbf{J} \rangle_V = -\mathbf{D}_0 \cdot \mathbf{G}_0 - \frac{V_a}{V} (\mathbf{D}_1 - \mathbf{D}_0) \cdot \langle \nabla c \rangle_{V_a} - \frac{V_s}{V} (\mathbf{D}_s - \mathbf{D}_0) \cdot \langle \nabla c \rangle_{V_s}. \quad (20)$$

Для материала с неоднородностью, на границе которой имеет место скачок поля, определяемый параметром сегрегации, справедливы следующие представления:

при наличии скачка концентрации –

$$\langle \mathbf{J} \rangle_V = -\mathbf{D}_0 \cdot \mathbf{G}_0 - \frac{V_1}{V} (\mathbf{D}_1 - s_c \mathbf{D}_0) \cdot \langle \nabla c \rangle_{V_1}, \quad (21)$$

при наличии скачка нормальной компоненты потока –

$$\langle \mathbf{J} \rangle_V = -\mathbf{D}_0 \cdot \mathbf{G}_0 - \frac{V_1}{V} (s_f \mathbf{D}_1 - \mathbf{D}_0) \cdot \langle \nabla c \rangle_{V_1}. \quad (22)$$

Представление тензоров вклада через тензоры концентрации

Средние градиенты концентрации, входящие в выражения (19) – (22), можно выразить для случая эллипсоидальной неоднородности через приложенное поле \mathbf{G}_0 , для чего ввести тензоры концентрации Λ_* , Λ_a , Λ_s , Λ_c , Λ_f , удовлетворяющие равенствам

$$\langle \nabla c \rangle_{V_1} = \Lambda_* \cdot \mathbf{G}_0 \text{ (для эквивалентной неоднородности),}$$

$$\langle \nabla c \rangle_{V_a} = \Lambda_a \cdot \mathbf{G}_0 \text{ и } \langle \nabla c \rangle_{V_s} = \Lambda_s \cdot \mathbf{G}_0 \text{ (для неоднородности с покрытием),}$$

$\langle \nabla c \rangle_{V_1} = \Lambda_c \cdot \mathbf{G}_0$ (для неоднородности, на границе которой имеет место скачок концентрации, определяемый через параметр сегрегации),

$\langle \nabla c \rangle_{V_1} = \Lambda_f \cdot \mathbf{G}_0$ (для неоднородности, на границе которой имеет место скачок нормальной компоненты потока, определяемый через параметр сегрегации).

Выражения для этих тензоров концентрации были получены в работах [8, 10 – 14]. Принимая их во внимание и учитывая формулы (10), (11), ограничимся здесь приведением окончательных выражений для тензоров вклада неоднородностей:

$$\mathbf{H}^D = D_0 \sum_{i=1}^3 \frac{D_{ii}^* - D_0}{D_{ii}^* A_i + D_0 (1 - A_i)} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i. \quad (23)$$

(для эквивалентной неоднородности с идеальными контактами [14]);

$$\mathbf{H}^D = D_0 \sum_{i=1}^3 \frac{D_1 - D_0 - D_0 D_1 \beta \frac{S_a}{V_a} A_i}{A_i D_1 + (1 - A_i) D_0 + (1 - A_i) D_0 D_1 \beta \frac{S_a}{V_a} \left(A_i - \frac{F_i}{H} \right)} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i \quad (24)$$

(для неоднородности с изолирующим покрытием);

$$\mathbf{H}^D = D_0 \sum_{i=1}^3 \frac{D_1 - D_0 + \lambda \frac{S_a}{V_a} (1 - A_i)}{A_i D_1 + (1 - A_i) D_0 + A_i \lambda \frac{S_a}{V_a} \left(1 - A_i + \frac{F_i}{H} \right)} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i \quad (25)$$

(для неоднородности с проводящим покрытием);

$$\mathbf{H}^D = D_0 \sum_{i=1}^3 \frac{D_1 - s_c D_0}{A_i D_1 + s_c D_0 (1 - A_i)} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i \quad (26)$$

(при наличии скачка концентрации, определяемого через параметр сегрегации s_c [8]),

$$\mathbf{H}^D = D_0 \sum_{i=1}^3 \frac{s_f D_1 - D_0}{A_i s_f D_1 + D_0 (1 - A_i)} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i \quad (27)$$

(при наличии скачка нормальной компоненты потока, определяемого через параметр сегрегации s_f [13]).

В случае сфероидальной неоднородности, при $a_1 = a_2 = a$, $\gamma = a_3/a$ справедливы следующие равенства:

$$\begin{aligned} A_1 = A_2 &= f_0(\gamma), \quad A_3 = 1 - 2f_0(\gamma), \\ F_1 = F_2 &= \frac{1}{a^2} \frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{\gamma^2} f_0(\gamma) - [1 - 2f_0(\gamma)] \right\}, \\ F_3 &= -\frac{1}{a^2} \left\{ \frac{1}{\gamma^2} f_0(\gamma) - [1 - 2f_0(\gamma)] \right\}, \end{aligned}$$

где

$$f_0(\gamma) = \frac{1 - g(\gamma)}{2(1 - \gamma^2)}, \quad g = g(\gamma) = \begin{cases} \frac{1}{\gamma\sqrt{1-\gamma^2}} \arctan \frac{\sqrt{1-\gamma^2}}{\gamma}, & \gamma \leq 1; \\ \frac{1}{2\gamma\sqrt{\gamma^2-1}} \ln \left(\frac{\gamma + \sqrt{\gamma^2-1}}{\gamma - \sqrt{\gamma^2-1}} \right), & \gamma \geq 1. \end{cases}$$

В случае сферической неоднородности $F_1 = F_2 = F_3 = 0$, $f_0(\gamma) = 1/3$.

Отметим, что согласно выводам, представленным в монографии [9], где рассматривались только сферические неоднородности, наличие изолирующего покрытия приводит к появлению скачка концентрации на границе раздела матрица/неоднородность, а наличие проводящего слоя – к появлению скачка нормальной компоненты потока, которые определяются через решение задачи для составной неоднородности при предельном переходе. Это соответствует физическим представлениям о моделируемом явлении, что было отмечено выше.

Для корректной реализации процедуры сравнения двух подходов к моделированию неидеального контакта (через задание скачка поля через соответствующий параметр сегрегации и посредством рассмотрения неоднородности с соответствующим типом поверхностного эффекта) определим далее, какой диффузионной проницаемостью \mathbf{D}^* должна обладать эквивалентная неоднородность, вклад которой в макроскопическое свойство совпадает с вкладом неоднородности с неидеальным контактом, моделируемым в рамках разных подходов.

Эквивалентная неоднородность

Начнем с рассмотрения неидеального контакта, когда имеет место оседание примеси на границе раздела матрица/неоднородность. При моделировании такого контакта путем задания скачка концентрации через параметр сегрегации, из равенства тензора вклада, определяемого выражением (26), и тензора вклада эквивалентной неоднородности, описываемого формулой (23), следует, что

$$\mathbf{D}^* = D^* \mathbf{I} = D_1/s_c \mathbf{I}, \quad (28)$$

т. е. материал эквивалентной неоднородности изотропен.

Видно, что компоненты тензора \mathbf{D}^* зависят только от параметра сегрегации и диффузионной проницаемости неоднородности, но не зависят от ее формы. Увеличение параметра сегрегации приводит к уменьшению диффузионной проницаемости эквивалентной неоднородности. При отсутствии оседания примеси (при $s_c = 1$) $D^* = D_1$. В зависимости от того, оседает примесь на границе раздела фаз снаружи или внутри, параметр сегрегации принимает соответственно значения $s_c > 1$ или $s_c < 1$.

В первом случае $D^* < D_1$, что отражает физику процесса, поскольку примесь проникает в неоднородность в меньшей степени и, чтобы добиться такого же эффекта при рассмотрении эквивалентной неоднородности, необходимо уменьшить ее проницаемость.

Во втором случае $D^* > D_1$, что также физически обосновано, так как эквивалентная неоднородность должна быть более проницаемой для примеси ввиду ее скопления внутри «реальной» неоднородности с неидеальным контактом.

При $s_c \rightarrow \infty$ $D^* \rightarrow 0$; это объясняется тем, что вся примесь скапливается снаружи неоднородности и она непроницаема для диффузанта.

При $s_c = D_1/D_0$ имеем $D^* = D_0$, т. е. наличие скачка концентрации

$$[c] = (D_1 - D_0)/D_0 c(\mathbf{x})|_{\mathbf{x} \rightarrow \Gamma^-}$$

позволяет игнорировать присутствие неоднородности при нахождении эффективных свойств.

В случае использования второго подхода к моделированию неидеального контакта, из равенства тензора вклада неоднородности с эквивалентной поверхностной сопротивляемостью (см. формулу (24)) и тензора вклада эквивалентной неоднородности (см. выражение (23)) следует, что

$$\mathbf{D}^* = \sum_{i=1}^3 D_1 \frac{1 - R \frac{S_a a_1 D_0}{V_a} \frac{F_i}{D_1 H} (1 - A_i)}{1 + R \frac{S_a a_1}{V_a} \left(A_i - \frac{F_i}{H} (1 - A_i) \right)} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i; \quad (29)$$

здесь для удобства введен безразмерный параметр эквивалентной поверхностной сопротивляемости $R = D_1 \beta / a_1$.

Тензор диффузионной проницаемости эквивалентной неоднородности, выраженный формулой (29), в общем случае ортотропен, группа его симметрии определяется формой неоднородности. При отсутствии поверхностного эффекта (при $R = 0$) тензор изотропен и $\mathbf{D}^* = \mathbf{D}_1$ ($D_{11}^* = D_{22}^* = D_{33}^* = D_1$). В общем случае коэффициенты диффузии D_{ii}^* могут принимать значения как большие D_1 , так и меньшие. Отметим, что при определенных значениях структурных характеристик (отношение коэффициентов диффузии примеси в матрице и в неоднородности, параметры формы неоднородности, величина эквивалентной поверхностной сопротивляемости) формально могут проявляться такие особенности, как перенаправление диффузионного потока вследствие появления отрицательных значений компонент тензора \mathbf{D}^* , а также возникновение бесконечной проницаемости эквивалентной неоднородности. Такие случаи нуждаются в отдельных качественном и количественном исследованиях, что выходит за рамки данной статьи.

Выражение (29) существенно упрощается в случае сферической неоднородности: тогда эквивалентная неоднородность характеризуется изотропным тензором

$$\mathbf{D}^* = D_1 / (1 + R) \mathbf{I}.$$

Из сравнения этого выражения с выражением (28) следует, что два подхода к моделированию неидеальных контактов на границе сферических неоднородностей совпадают при

$$s_c = 1 + R. \quad (30)$$

Перейдем к рассмотрению неидеального контакта, когда в материале присутствуют дополнительные обходные пути диффузии на границе раздела фаз. При моделировании такого контакта посредством задания скачка нормальной компоненты потока через параметр сегрегации, из равенства тензоров вклада, определяемых выражениями (27) и (23), следует, что

$$\mathbf{D}^* = D^* \mathbf{I} = D_1 s_f \mathbf{I}. \quad (31)$$

Тензор диффузии \mathbf{D}^* , определяемый формулой (31), зависит только от параметра сегрегации и от диффузионной проницаемости неоднородности и не зависит от ее формы.

Увеличение параметра сегрегации приводит к увеличению диффузионной проницаемости эквивалентной неоднородности. При отсутствии поверхностных дефектов (при $s_f = 1$) $D^* = D_1$. При $s_f \rightarrow \infty$ эквивалентная неоднородность характеризуется бесконечной проницаемостью независимо от свойств неоднородности (в этом случае вся примесь будет мгновенно диффундировать по поверхности). В случае $s_f = D_0/D_1$ выполняется равенство $D^* = D_0$.

При моделировании неидеального контакта с использованием второго подхода, равенство тензоров вклада, определяемых выражениями (25) и (23), дает следующий результат:



$$\mathbf{D}^* = \sum_{i=1}^3 D_1 \frac{1 + K \frac{S_a a}{V_a} \left(1 - A_i + \frac{F_i}{H}\right)}{1 + K \frac{S_a a}{V_a} \frac{D_1}{D_0} \frac{F_i}{H} A_i} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i, \quad (32)$$

где введен безразмерный параметр эквивалентной поверхностной проницаемости $K = \lambda / (D_1 a_1)$.

Тензор диффузионной проницаемости эквивалентной неоднородности, определяемый выражением (32), в общем случае ортотропен. При отсутствии поверхностного эффекта (при $K = 0$) $\mathbf{D}^* = \mathbf{D}_1$. При наличии поверхностного эффекта коэффициенты диффузии могут принимать значения и больше D_1 , и меньше. В определенном диапазоне значений структурных характеристик, как и в случае изолирующего покрытия, компоненты D_{ii}^* могут принимать значения меньше нуля, что с физической точки зрения означает перенаправление потока, а также обращаться в бесконечность. Оба случая требуют отдельного исследования, выходящего за рамки настоящей работы.

Выражение (32) в случае сферических неоднородностей имеет вид

$$\mathbf{D}^* = D_1 (1 + 2K) \mathbf{I},$$

откуда следует, с учетом формулы (31), что два подхода к моделированию неидеальных контактов эквивалентны при

$$s_f = 1 + 2K. \quad (33)$$

Подводя итог, можно отметить следующие качественные различия между двумя подходами к моделированию неидеальных контактов.

1. При учете неидеального контакта посредством задания скачка поля через постоянный параметр сегрегации, группа симметрии тензора диффузионной проницаемости эквивалентной неоднородности совпадает с таковой для исходной неоднородности (в частности, выше было показано, что изотропия тензора \mathbf{D}_1 влечет за собой изотропию тензора \mathbf{D}^* ; более подробное исследование общего анизотропного случая представлено нами в статье [8]). В результате компоненты тензора диффузионной проницаемости эквивалентной неоднородности зависят только от физических свойств неоднородности и параметра сегрегации. В случае моделирования неидеального контакта путем рассмотрения неоднородности с поверхностным эффектом, компоненты тензора \mathbf{D}^* зависят как от свойств покрытия и материала неоднородности, так и от ее формы.

Два подхода к моделированию неидеальных контактов приводят к одним и тем же результатам только в случае материала со сферическими неоднородностями, при условии выполнения либо равенства (30), либо (33), в зависимости от типа неидеального контакта.

2. При учете неидеального контакта посредством задания скачка поля через постоянный параметр сегрегации, компоненты тензора диффузионной проницаемости эквивалентной неоднородности линейно зависят либо от величины $(s_c)^{-1}$, либо от параметра s_f . В случае моделирования неидеального контакта через рассмотрение неоднородности с поверхностным эффектом, компоненты тензора \mathbf{D}^* нелинейно зависят от характеристик покрытия R или K (или обратных к ним величин). При этом данные зависимости, во-первых, различны для разных направлений, во-вторых, при определенных значениях характеристик структуры, могут принимать отрицательные значения, что, по всей видимости, означает перенаправление диффузионного потока, а также обращаться в бесконечность. Эти случаи нуждаются в дальнейшем исследовании на предмет соответствия физическим представлениям о моделируемом явлении.

Результаты моделирования неидеальных контактов

Проведем количественный анализ влияния способа учета неидеального контакта на границе раздела фаз на диффузионную проницаемость эквивалентной неоднородности на примере поликристалла.

Поликристалл будем считать двухфазным материалом, состоящим из матрицы, которая моделирует границы зерен, и вытянутых сфероидальных неоднородностей,

моделирующих зерна меньшей диффузионной проницаемостью [7, 16]. Примем для определенности значения $D_1/D_0 = 0,2$, $\gamma = a_3/a = 100$ ($a_1 = a_2 = a$). В поликристаллах неидеальные контакты могут возникать по разным причинам, что должно моделироваться разными способами. Дадим их краткое описание.

1. Явление сегрегации, которое характерно для диффузии и под которой понимается оседание примеси по границам зерен с внешней стороны, можно моделировать либо через задание скачка концентрации с помощью параметра сегрегации s_c (I), либо за счет рассмотрения изолирующего покрытия с эквивалентной сопротивляемостью R (II). Допустим, что $s_c = 1 + R$, что, с одной стороны, справедливо для случая материала со сферическими неоднородностями, с другой, удовлетворяет условию $s_c = 1$ при $R = 0$ в случае идеальных контактов в материале с неоднородностями произвольной формы.

2. За счет растрескивания, по границам зерен могут образовываться дополнительные ускоренные пути диффузии; их можно учесть либо путем задания скачка нормальной компоненты потока через параметр сегрегации s_f (III), либо путем рассмотрения проводящего покрытия, характеризующегося эквивалентной проводимостью K (IV). По тем же соображениям, что и при выборе зависимости $s_c(R)$, примем, что $s_f = 1 + 2K$.

Зависимости диффузионной проницаемости эквивалентной неоднородности при наличии сегрегации, т. е. в случае неидеального контакта, моделируемого способами I и II, представлены на рис. 1,а. Увеличение параметра R приводит к уменьшению компонент тензора \mathbf{D}^* . Это, в свою очередь, должно привести впоследствии (при дальнейшем применении методов гомогенизации, не рассматриваемых в рамках настоящей работы) к уменьшению эффективной проницаемости материала.

Отметим, что параметр R формально может принимать значения от нуля до бесконечности. Для проведения количественного анализа мы, тем не менее, ограничились рассмотрением меньшего диапазона, при котором поток не меняет направление на противоположное, что имело бы место при отрицательных значениях коэффициентов D_{ii}^* и что, как отмечалось выше, нуждается в проведении дополнительного анализа.

Стоит также отметить, что при использовании подхода II наблюдается разница в поведении кривых убывания коэффициентов диффузии D_{33}^* вдоль оси симметрии неоднородности и коэффициентов $D_{11}^* = D_{22}^*$ в плоскости изотропии.

При выбранном наборе параметров структуры, коэффициенты $D_{11}^* = D_{22}^*$ изменяются так же, как и компоненты изотропного тензора \mathbf{D}^* , вводимого при использовании I подхода.

Зависимости диффузионной проницаемости эквивалентной неоднородности при наличии растрескивания, т.е. случае неидеального контакта, моделируемого способами III и IV, представлены на рис. 1,б.

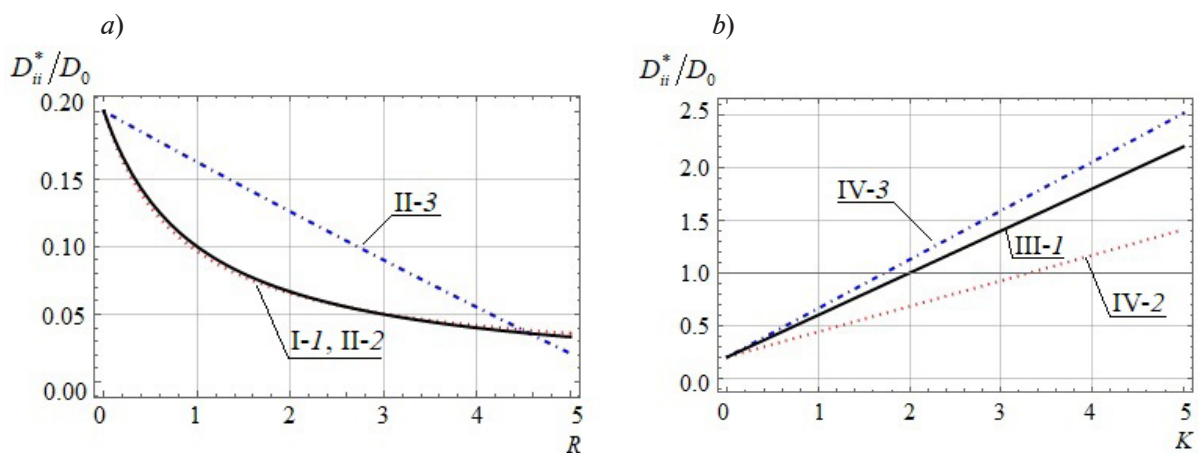


Рис. 1. Зависимости коэффициентов диффузии примеси в эквивалентной неоднородности от параметров R (а) и K (б) для случая неидеального контакта, моделируемого способами I, II (а) и III, IV (б) (см. пояснения в тексте).

Представлены следующие коэффициенты диффузии: $D_{11}^* = D_{22}^* = D_{33}^*$ (сплошные линии I-1 и III-1) при использовании подходов I и III; $D_{11}^* = D_{22}^*$ (точечные линии II-2 и IV-2) и D_{33}^* (линии II-3 и IV-3) при использовании подходов II и IV



Увеличение параметра K приводит к возрастанию компонент тензора \mathbf{D}^* , которые изменяются по-разному, в зависимости от способа моделирования неидеального контакта, а также от направления в случае подхода IV. В дальнейшем такой характер изменения проницаемости эквивалентной неоднородности должен привести и к увеличению эффективной проницаемости материала. Параметр K , как и параметр R , формально может принимать значения от нуля до бесконечности, при этом при некотором значении K компонента обратится в бесконечность, что, как обсуждалось выше, нуждается в проведении дополнительного анализа, выходящего за рамки настоящей статьи.

Важно, что компоненты D_{ii}^* принимают значения как меньшие, так и большие D_0 , в зависимости от величины K (D_{ii}^*/D_0 может быть как меньше, так и больше единицы).

Таким образом, способ учета неидеального контакта на границе раздела матрицы и несферической неоднородности оказывает непосредственное влияние на эффективные свойства материала. Для выбора оптимального подхода необходимо сравнивать результаты численного моделирования с экспериментальными данными. Вопрос такого сравнения сопряжен, в свою очередь, со сложностями идентификации характеристик структуры и требует отдельного исследования.

Заключение

В работе предложено обобщение имеющихся в литературе подходов к моделированию неидеальных контактов на границе раздела фаз неоднородного на микроуровне материала при определении его эффективных свойств различной природы.

Учтено, что такие контакты могут возникать в материале по разным причинам: в силу особенной внутренней структуры и в связи со спецификой описываемого процесса, что влияет на физическую интерпретацию модели, но не влияет на используемый математический аппарат. Конкретизация проведена на примере диффузионной задачи. Рассмотрен общий случай материала с эллипсоидальными неоднородностями и проведено сравнение двух подходов к моделированию неидеальных контактов: посредством введения скачка поля (концентрации или нормальной компоненты потока) через постоянный параметр сегрегации и посредством рассмотрения неоднородности с поверхностным эффектом (соответственно с наличием изолирующего или проводящего покрытия).

Показано, что два подхода эквивалентны только в случае материала со сферическими неоднородностями, тогда как в иных случаях данные способы дают качественно и количественно разные результаты.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Kaur I., Mishin Yu., Gust W.** Fundamentals of grain and interphase boundary diffusion. Third Edition. London: John Wiley & Sons, 1995. 536 p.
2. **Zhang Y., Liu L.** On diffusion in heterogeneous media // American Journal of Science. 2012. Vol. 312. No. 9. Pp. 1028–1047.
3. **Dumont S., Serpilli M., Rizzoni R., Lebon F. C.** Numerical validation of multiphysics imperfect interfaces models // Frontiers in Materials. 2020. Vol. 7. 05 June. P. 158.
4. **Costa R., Nobrega J. M., Clain S., Machado G. J.** Very high-order accurate polygonal mesh finite volume scheme for conjugate heat transfer problems with curved interfaces and imperfect contacts // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. 2019. Vol. 357. 1 December. P. 112560.
5. **Kalnin J. R., Kotomin E. A., Maier J.** Calculations of the effective diffusion coefficient for inhomogeneous media // Journal of Physics and Chemistry of Solids. 2002. Vol. 63. No. 3. Pp. 449–456.
6. **Belova I. V., Murch G. E.** Calculation of the effective conductivity and diffusivity in composite solid electrolytes // Journal of Physics and Chemistry of Solids. 2005. Vol. 66. No. 5. Pp. 722–728.
7. **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.
8. **Frolova K. P., Vilchevskaya E. N.** Effective diffusivity of transversely isotropic material with embedded pores // Materials Physics and Mechanics. 2021. Vol. 47. No. 6. Pp. 937–950.

9. **Markov K. Z.** Elementary micromechanics of heterogeneous media. Heterogeneous media: micromechanics modeling methods and simulations. Boston, USA: Birkhäuser, MA, 2000. 162 p.
10. **Endres A. L., Knight R. J.** A model for incorporating surface phenomena into the dielectric response of a heterogeneous medium // *Journal of Colloid and Interface Science*. 1993. Vol. 157. No. 2. Pp. 418–425.
11. **Levin V., Markov M.** Effective thermal conductivity of micro-inhomogeneous media containing imperfectly bonded ellipsoidal inclusions // *International Journal of Engineering Science*. 2016. Vol. 109. December. Pp. 202–215.
12. **Markov M., Levin V., Markova I.** Determination of effective electromagnetic parameters of concentrated suspensions of ellipsoidal particles using Generalized Differential Effective Medium approximation // *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. 2018. Vol. 492. 15 February. Pp. 113–122.
13. **Фролова К. П., Вильчевская Е. Н., Полянский В. А.** Моделирование неидеальных контактов при определении эффективных коэффициентов диффузии // *Вестник Санкт-Петербургского университета. Математика. Механика. Астрономия*. 2023. Т. 10(68). № 4. С. 650–664.
14. **Kachanov M., Sevostianov I.** Micromechanics of materials, with applications. Series “Solid Mechanics and its Applications”. Vol. 249. Berlin, Germany: Springer, 2018. 712 p.
15. **Fricke H.** A mathematical treatment of the electric conductivity and capacity of disperse systems I. The electric conductivity of a suspension of homogeneous spheroids // *Physical Review*. 1924. Vol. 24. No. 5. Pp. 575–587.
16. **Пашковский Д. М., Фролова К. П., Вильчевская Е. Н.** Эффективные диффузионные свойства поликристалла // *Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки*. 2022. Т. 15. № 3. С. 154–168.

REFERENCES

1. **Kaur I., Mishin Yu., Gust W.**, Fundamentals of grain and interphase boundary diffusion, Third Edition, John Wiley & Sons, London, 1995.
2. **Zhang Y., Liu L.**, On diffusion in heterogeneous media, *Am. J. Sci.* 312 (9) (2012) 1028–1047.
3. **Dumont S., Serpilli M., Rizzoni R., Lebon F. C.**, Numerical validation of multiphysic imperfect interfaces models, *Front. Mater.* 7 (5 June) (2020) 158.
4. **Costa R., Nobrega J. M., Clain S., Machado G. J.**, Very high-order accurate polygonal mesh finite volume scheme for conjugate heat transfer problems with curved interfaces and imperfect contacts, *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.* 357 (1 Dec) (2019) 112560.
5. **Kalnin J. R., Kotomin E. A., Maier J.**, Calculations of the effective diffusion coefficient for inhomogeneous media, *J. Phys. Chem. Solids.* 63 (3) (2002) 449–456.
6. **Belova I. V., Murch G. E.**, Calculation of the effective conductivity and diffusivity in composite solid electrolytes, *J. Phys. Chem. Solids.* 66 (5) (2005) 722–728.
7. **Knyazeva A. G., Grabovetskaya G. P., Mishin I. P., Sevostianov I.**, On the micromechanical modelling of the effective diffusion coefficient of a polycrystalline material, *Philos. Mag.* 95 (19) (2015) 2046–2066.
8. **Frolova K. P., Vilchevskaya E. N.**, Effective diffusivity of transversely isotropic material with embedded pores, *Mater. Phys. Mech.* 47 (6) (2021) 937–950.
9. **Markov K. Z.**, Elementary micromechanics of heterogeneous media. Heterogeneous media: micromechanics modeling methods and simulations, Birkhäuser, Boston, MA, 2000.
10. **Endres A. L., Knight R. J.**, A model for incorporating surface phenomena into the dielectric response of a heterogeneous medium, *J. Colloid Interface Sci.* 157 (2) (1993) 418–425.
11. **Levin V., Markov M.**, Effective thermal conductivity of micro-inhomogeneous media containing imperfectly bonded ellipsoidal inclusions, *Int. J. Eng. Sci.* 109 (Dec) (2016) 202–215.
12. **Markov M., Levin V., Markova I.**, Determination of effective electromagnetic parameters of concentrated suspensions of ellipsoidal particles using Generalized Differential Effective Medium approximation, *Phys. A: Stat.* 492 (15 Febr) (2018) 113–122.
13. **Frolova K. P., Vilchevskaya E. N., Polyanskiy V. A.**, Modeling of imperfect contacts in determining the effective diffusion permeability, *Vestnik of Saint Petersburg University. Mathematics. Mechanics. Astronomy.* 10 (68) (4) (2023) 650–664 (in Russian).



14. **Kachanov M., Sevostianov I.**, Micromechanics of materials, with applications. Ser. “Solid Mechanics and its Applications” (Vol. 249), Springer, Berlin, 2018.
15. **Fricke H.**, A mathematical treatment of the electric conductivity and capacity of disperse systems I. The electric conductivity of a suspension of homogeneous spheroids, *Phys. Rev.* 24 (5) (1924) 575–587.
16. **Pashkovsky D. M., Frolova K. P., Vilchevskaya E. N.**, Effective diffusion properties of a polycrystal, *St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics.* 15 (3) (2022) 154–168 (in Russian).

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ФРОЛОВА Ксения Петровна – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Института проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, Россия.
199178, Россия, г. Санкт-Петербург, Большой проспект В. О., 61.
fkr@ipme.ru
ORCID: 0000-0003-0376-4463

ВИЛЬЧЕВСКАЯ Елена Никитична – доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Института проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, Россия.
199178, Россия, г. Санкт-Петербург, Большой проспект В. О., 61.
vilchevskaya_en@spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-5173-3218

THE AUTHORS

FROLOVA Ksenia P.
Institute for Problems in Mechanical Engineering, RAS
61 Bolshoi Ave., V. Isl., St. Petersburg, 199178, Russia
kspfrolova@gmail.com
ORCID: 0000-0003-0376-4463

VILCHEVSKAYA Elena N.
Institute for Problems in Mechanical Engineering, RAS
61 Bolshoi Ave., V. Isl., St. Petersburg, 199178, Russia
vilchevskaya_en@spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-5173-3218

*Статья поступила в редакцию 22.09.2023. Одобрена после рецензирования 23.10.2023.
Принята 23.10.2023.
Received 22.09.2023. Approved after reviewing 23.10.2023. Accepted 23.10.2023.*