МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ В ПОЛИКРИСТАЛЛАХ НА МЕЗОУРОВНЕ

Осташев В.В., Шевченко О.Д.

Псковский политехнический институт,
180680, Псков, ул. Л.Толстого, 4, Россия.
E-mail: tkm@ppi.psc.ru

На основе физических положений мезомеханики среды рассмотрены три модели развития пластических деформаций в поликристаллах: распределенная, точечная, статистическая. Деформируемый материал рассматривается как многоуровневая иерархическая динамическая система. Выявлен ряд новых кинетических закономерностей развития микропластических деформаций на мезоуровне.

В основе моделей физической мезомеханики лежит описание нелинейных взаимодействий крупномасштабных деформационных дефектов, называемых мезодефектами, а сам деформируемый материал рассматривается как многоуровневая иерархическая диссипативная динамическая система [1].

Линейные, сдвиговые и поворотные составляющие микропластических деформаций для структурного уровня x_i, определенные по ансамблю мезодефектов, описываются некоторыми случайными функциями $\varepsilon_{ij}(x_i|e_j)_{i=1,2,3,4}$ [2].

При этом:

$\varepsilon_{1j}(x_1|e_j)_{i=1}$ – средняя пластическая деформация образца, измеренная на рабочей длине (структурный уровень I).

$\varepsilon_{2j}(x_2|e_j)_{i=2}$ – флуктуации микропластических деформаций, измеренные на мезоуровне II – взаимодействия групп зерен, как целого.

$\varepsilon_{3j}(x_3|e_j)_{i=3}$ – флуктуации микропластических деформаций, измеренные на мезоуровне III – межзеренных взаимодействий.

$\varepsilon_{4j}(x_4|e_j)_{i=4}$ - флуктуации микропластических деформаций, измеренные на мезоуровне IV – внутризеренные взаимодействия дефектов.

e_j – средняя пластическая деформация на j ступени нагружения.

В общем случае поведение поликристаллического материала на мезоуровне может быть описано тремя видами моделей: распределенной, точечной, статистической.

1. Строго говоря, деформируемый поликристаллический материал должен рассматриваться как распределенная система, т.е. параметры кинетических составляющих самого процесса зависят от времени и координат. Формализация этих условий может быть отражена на деформируемый поликристаллический материал, отождествлением его с возбудимой средой.

Для иллюстрации возможности самозарождения и устойчивого развития локализованных структур в поликристаллической меди МО численно исследована одна из базовых моделей нелинейных сред – двумерная решеточная модель Гинзбурга-Ландау.

Модель предполагает взаимодействие сдвиговых и поворотных мод пластической деформации и содержит два кинетических уравнения, связывающие локальные сдвиговые и поворотные моды деформации:

$$X_t=Q_1(x,y,\lambda)+D_\gamma X_{xx}, \qquad X=\gamma_{xy}, \tag{1}$$
$$Y_t=Q_2(x,y,\lambda)+D_\omega Y_{xx}, \qquad Y=\omega_z .$$

При граничных и начальных условиях соответсвенно:

$$X_x=(a,t)=Y_x(a,t)=X_x(b,t)=Y_x(b,t)=0,$$
$$X(x,0)=X_0(x), \qquad Y(x,0)=Y_0(x).$$

В общем случае: λ – управляющий параметр, зависящий от условий деформирования; a,b – границы представительного объема; D_γ, D_ω – транспортные коэффициенты.

Заменой $s=\gamma_{xy}+i\omega_z$ система сводится к уравнению Гинзбурга-Ландау:

$$\frac{\partial s}{\partial t}=s-(1+i\beta)\left|s^2\right|s+e(1-ic)\nabla^2 s \tag{2}$$

Интегрирование уравнения (2) проведено численным методом Рунге-Кутта четвертого порядка, граничные условия на решетке определялись по результатам измерения полей смещения узлов делительной сетки с ячейкой 20 мкм, нанесенной непосредственно на деформируемый образец, и расчета всех составляющих тензора дисторсии. Количественный расчет структурных уровней деформации проведен по методике [3].

2. Строгое математическое определение точечной системы можно сделать при предельных переходах в распределенных системах. Точечная система реализуется в двух случаях: $D_\gamma=D_\omega=0$ и $D_\gamma=D_\omega=\infty$:

- $D_\gamma=D_\omega=0$ – выполнение данного условия физически можно представить при малых пластических деформациях, когда роль мезоуровня мала.
- $D_\gamma=D_\omega=\infty$ – во всем пространстве представительного объема (a,b) на структурном уровне процесс деформирования протекает так же как и в бесконечно малом объеме, т.е. процесс взаимодействия между сдвигами и поворотами будет изменяться синхронно во всех точках $r\in[a,b]$.

В обоих случаях дефектную структуру можно считать хорошо перемешанной и при ее описании пространственные эффекты можно не учитывать.

Исходя из основных физических положений мезомеханики среды [1], внутренние связи деформируемого поликристаллического материала можно отразить графом (рис.1).

Структура дифференциальных уравнений для точечных моделей, согласно графическому представлению (рис.1) выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned} x_t &= a_1x-b_1xz-e_{11}x^2-e_{12}xy=P(x,y,z); && x=\gamma_{xy}, \\ y_t &= a_2y-b_2yz-e_{21}xy-e_{22}y^2=Q(x,y,z); && y=\omega_z, \\ z_t &= -cz+d_1xz+d_2yz=M(x,y,z); && z=\varepsilon_{xx}. \end{aligned} \tag{3}$$

Запрет на неограниченное возрастание x_t, y_t в первых двух уравнениях учитывается слагаемыми со знаком минус, что физически предполагает действие вторичных потоков дефектов. Коэффициенты e_{11}, e_{22}, e_{21}, e_{12} характеризуют межмодовую и внутримодовую конкуренцию, связанную с первичными и вторичными аккомодационными процессами развития сдвигов и поворотов.

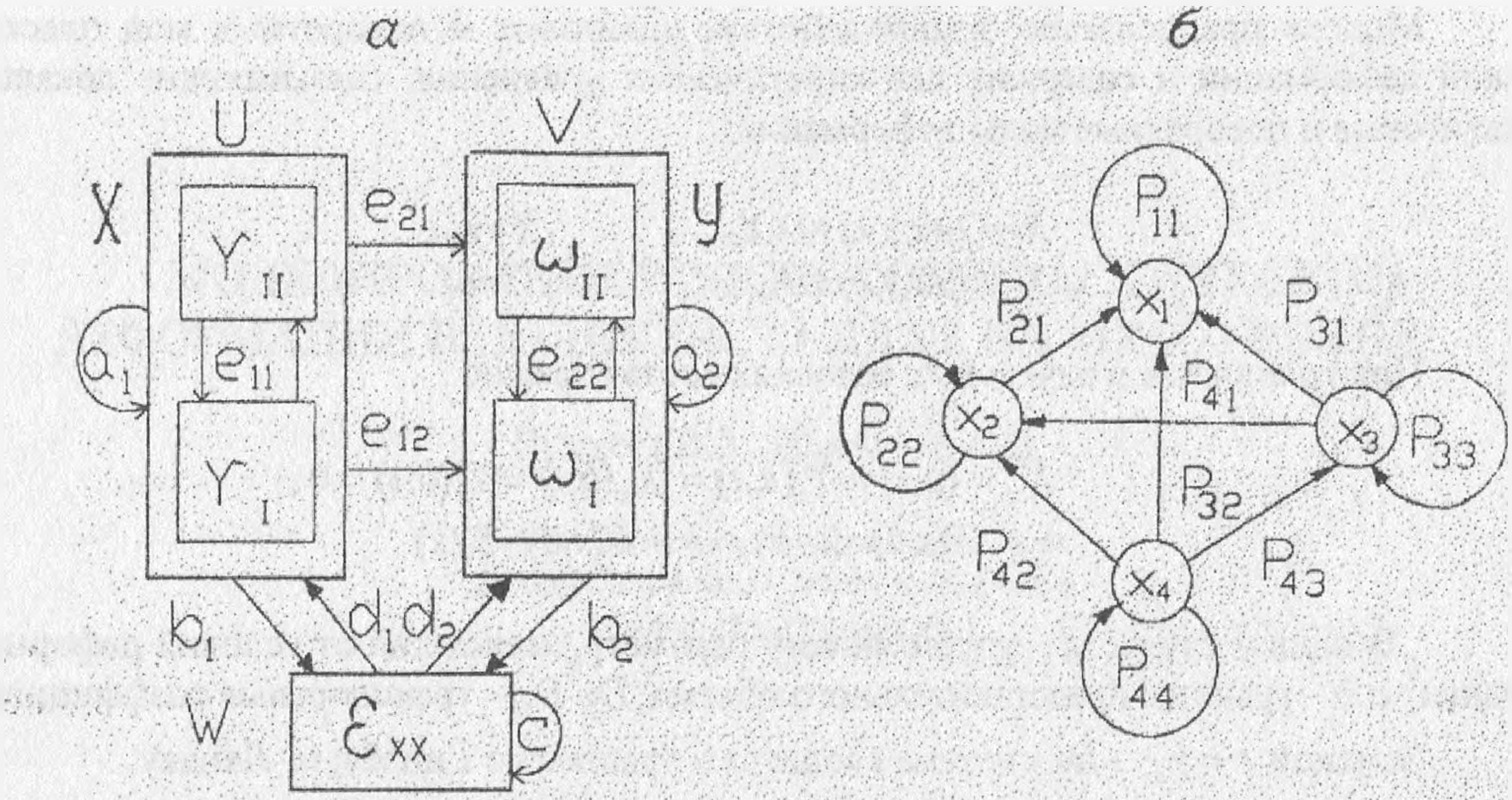

Рис. 1. Графическое представление модели деформируемого поликристаллического материала.
а) точечная модель; б) статистическая модель.

Исследование модели проводится по следующему плану:

- Относительно функций *P(x,y,z), Q(x,y.z), M(x,y,z)* предполагается, что они являются достаточно гладкими функциями. С учетом смысловой нагрузки переменных модели первоначально необходимо проверить возможность выхода траекторий системы при неотрицательных начальных данных за границы первой четверти. Если выполняются условия $P(0,y,z)\geq 0$, $Q(x,0,z)\geq 0$, $M(x,y,0)\geq 0$, то траектории не выходят за границы первой четверти при любых неотрицательных начальных данных.
- Необходимо показать, что в первой четверти существует ограниченное замкнутое множество, за границы которого траектории не выходят, т.е. доказать ограниченность решений модели. При отсутствии диффузионных процессов данное ограниченное множество должно включать в себя начало координат.
- Определяется поведение главных изоклин модели $P=0$, $Q=0$, $M=0$ – вертикальных и горизонтальных наклонов траекторий. Изоклины являются границами областей, в которых соответствующая переменная монотонно возрастает или убывает. Точки пересечения кривых являются стационарными точками модели (точки равновесия системы).
- Проводится исследование эволюции динамических режимов при изменении параметров в системе (3) , при переходе их через бифуркационные значения. Строится параметрический портрет.

3. Моделирование кинетики пластической деформации марковскими цепями развивает представление о процессах деформации в статистической многоуровневой интерпретации на основе сигнального графа состояний [2].

Задача исследования заключается в следующем:

– определение границ и интервалов работы материала на анализируемом уровне;
– определение переходной вероятности нахождения системы на одном из уровней в зависимости от степени макроскопической деформации;
– корреляция между статистической и физической моделью.

В соответствии с классификацией марковских цепей состояние материала на уровне I может быть определено, как поглощающее, где вероятности перехода подчиняются условиям P_{ii}=1, P_{ij}=0. Состояния на уровнях II, III, IV определяются как невозвратные. Таким образом, сигнальный граф состояний (рис.2,3) описывает работу деформируемого поликристаллического материала в виде марковской цепи с четырьмя состояниями – три из них невозвратные (x_2,x_3,x_4), одно-поглощающее (x_1).

Переходная матрица для модели из четырех состояний может быть записана в виде:

$$P=\begin{pmatrix} P_{11} & P_{12} & P_{13} & P_{14} \\ P_{21} & P_{22} & P_{23} & P_{24} \\ P_{31} & P_{32} & P_{33} & P_{34} \\ P_{41} & P_{42} & P_{43} & P_{44} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ P_{21} & P_{22} & 0 & 0 \\ P_{31} & P_{32} & P_{33} & 0 \\ P_{41} & P_{42} & P_{43} & P_{44} \end{pmatrix} \quad (4)$$

По определению $P_{12} = P_{13} = P_{14} = 0, \quad P_{23} = P_{24} = P_{34} = 0.$

Матрицу (4) представим в канонической форме:

$$P=\begin{pmatrix} I & 0 \\ R & Q \end{pmatrix}. \quad (5)$$

Подматрица Q описывает поведение материала в множестве невозвратных состояний до перехода в поглощающее состояние; подматрица R включает в себя только элементы, характеризующие переход из невозвратных состояний в поглощающие. Характер изменения элементов подматрицы Q в зависимости от условий факторного эксперимента позволяет определить количественные характеристики поглощающей цепи:

- вероятность достижения поглощающего состояния из любого рассматриваемого;
- весовой вклад каждого из уровней в среднюю деформацию материала.

Характеристики определяются через фундаментальную матрицу:

$$N=(I-Q)^{-1} \quad (6)$$

Каждый элемент фундаментальной матрицы показывает среднее число попаданий процесса в данное невозвратное состояние в зависимости от начального, а сумма значений по строкам характеризует весовой вклад каждого из уровней в среднюю деформацию материала.

4. Общим признаком анализируемых моделей является их кинетический характер – возможности описания в зависимости от начальных условий (параметров нагружения) устойчивых деформационных структур и способности их к развитию.

По результатам компьютерного расчета можно сказать, что с увеличением надкритичности поле деформации вне зависимости от условий нагружения характеризуется набором микровихрей, их движением и взаимодействием. При одинаковых средних деформациях и транспортных коэффициентах на начальной стадии пластического деформирования образуется модулированная структура, отражающая бегущую волну возбуждения. С увеличением степени деформации для условий максимальной пластичности характерно образование ротационно-трансляционных вихрей с наложением модулированной структуры, формирование сдвиговой границы, которая в конечном счете разбивается микроротациями. В образце с максимальными характеристиками прочности модулированная структура превращается в локальные образования типа спиральных волн, охватывающие группу зерен. Вид поля деформаций для образца с комплексом характеристик прочности и пластичности меняется в широком диапазоне от комбинации микровихрей с полосой сдвига до спиральной волны в зависимости от значения коэффициента нелинейной дисперсии.

На структурную организацию деформируемого материала влияют два параметра: интенсивность роста сдвигов и поворотов и интенсивность взаимодействия этих элементов в процессе развития системы. Совместное исследование распределенной и точечной модели показывает, что количественный рост сдвиговых и поворотных мод деформации создает предпосылки для перехода в неустойчивое состояние, а интенсивное развитие деформации на новом структурном уровне происходит в результате взаимодействия сдвигов и поворотов.

Многоуровневый анализ распределенной модели показывает, что при оценке пластичности возможным является соотношение между недетерминированностью развития деформационных структур на каждом структурном уровне и «индуцирующим влиянием подстилающих структур». По аналогии с живой природой речь идет о формировании морфогенетических полей, обладающих позиционной информацией, которая передается с уровня на уровень, определяя механизм пластической деформации. Идея передачи позиционной информации в морфогенетическом поле каждого структурного уровня может быть отражена и в статистической модели нашей работы, как превышении значимости одного уровня над другим.

Совместный анализ точечной и статистической модели показывает, что триггерный механизм (переключения) более соответсвует материалу с максимальными характеристиками прочности -- при этом всегда наблюдается последовательность структурных уровней, и вклад их в среднюю деформацию соответствует триггерному механизму в точечной модели.

С точки зрения управления механическими свойствами поликристаллических материалов интерес представляет исследование автоколебательного режима особой точки равновесия D в точечной модели, и это является темой отдельной работы.

Список литературы

1. Физическая мезомеханика и компьютерное конструирование материалов. Т.2,1. Ред. Панин В.Е. Новосибирск: Наука, 1995.
2. Осташев В.В., Шевченко О.Д. Моделирование кинетики пластических деформаций марковскими цепями // Письма в ЖТФ, Т.24, Вып. 15, 1998, С. 8-12.
3. Осташев В.В., Шевченко О.Д. Дефекты мезоуровня и принципы структуризации в мезомеханике. // Материалы семинара «Актуальные проблемы прочности». Механизмы деформации и разрушения перспективных материалов. Псков, 1999, Т.2, С. 433-436.