



XX Международная конференция МЕХАНИКА, РЕСУРС И ДИАГНОСТИКА материалов и конструкций

**пермский
политех**

ФАКУЛЬТЕТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ И МЕХАНИКИ
КАФЕДРА МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ
СИСТЕМ И ПРОЦЕССОВ

ФИЗИЧЕСКИ-ОРИЕНТИРОВАННАЯ МОДЕЛЬ ДЛЯ АНАЛИЗА ДЕФОРМИРОВАНИЯ ДВУХФАЗНЫХ МАТЕРИАЛОВ: ОПИСАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДИСЛОКАЦИЙ С ГРАНИЦАМИ ЗЕРЕН

Курмоярцева К.А.¹, Трусов П.В.

Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь, Россия
¹kurmoiarceva.k@mail.ru.

Цель исследования:

- Разработка прямой физически-ориентированную математической модели, основанной на физических теориях упруговязкопластичности и континуальном описании дислокаций на системах скольжения (СС) для учета взаимодействия дислокаций с границами зерен.

Задачи исследования

- Обзор механизмов взаимодействия границ зерен и дислокаций (экспериментальные и теоретические исследования)
- Обзор существующих моделей для описания влияния взаимодействия границ зерен и дислокаций
- Разработка подмодели для описания межкристаллитных потоков дислокаций
- Идентификация/верификация подмодели
- Описание с помощью разработанной подмодели процесса образования скоплений, упрочнения, эффектов влияния размера зерна (закон Холла – Петча)
- Численная реализация разработанной модели для решения поставленной задачи

Концептуальная постановка:

Модель должна описывать

- эволюцию дислокационной субструктуры, процессы образования скоплений на границах зерен и субзерен;
- деформирование в широком диапазоне изменения параметров термомеханических воздействий;
- межкристаллитные потоки дислокаций.

Разрабатываемая модель представляет собой подмодель, встраиваемую в общую трехуровневую модель.

Математическая постановка

Мезоуровень-I

$$\begin{aligned} \sigma + \sigma \cdot \omega - \omega \cdot \sigma &= \Pi : (z - z^{in}), \\ z &= \nabla v^T - \omega \\ z &= z^e + z^{in} \\ \omega &= \dot{\omega} \cdot t^T \\ z^{in} &= \sum_{k=1}^n \dot{\gamma}^{(k)} \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)} \\ \dot{\gamma}^{(k)} &= b^{(k)} (\rho_+^{(k)} v_+^{(k)} - \rho_-^{(k)} v_-^{(k)}), \\ \tau^{(k)} &= \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)} : \sigma. \end{aligned}$$

$\rho_{\pm}^{(k)}, v_{\pm}^{(k)}$

Разделение дислокаций на положительные и

Мезоуровень-II

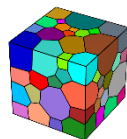
$$v_{\pm}^{(k)} = \pm l^{(k)} v \exp \left[-\frac{\Delta G_{\pm}^{(k)}}{\kappa \theta} \right] H(|\tau^{(k)}| - \tau_{ct}^{(k)}) \text{sign}(\tau^{(k)}),$$

Средняя скорость движения дислокаций на СС

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_{\pm}^{(k)} &= \dot{\rho}_{mic}^{(k)} + \dot{\rho}_{in\pm}^{(k)} - \dot{\rho}_{ann}^{(k)} - \dot{\rho}_{out\pm}^{(k)} \\ \dot{\rho}_{ct}^{(k)} &= \dot{\rho}_{dis}^{(k)} + \dot{\rho}_{bar}^{(k)} + \dot{\rho}_{boun}^{(k)}, \\ \dot{\rho}_{ann}^{(k)} &= h_{ann} \rho_{\pm}^{(k)} |v_{\pm}^{(k)} - v_{\pm}^{(k)}|, \\ \dot{\rho}_{mic}^{(k)} &= r_{ep} \rho_{src}^{(k)} v \left(\frac{|\tau^{(k)}|}{\tau_{src}} - 1 \right)^p, \\ \dot{\rho}_{src}^{(k)} &= \sum_j L_{bar}^{kj} \rho_{bar}^{(j)} |v_{\pm}^{(j)}|, \\ \dot{\rho}_{bar}^{kj} &= \alpha x_d \sum_j R_{bar}^{kj} \rho_{\pm}^{(j)} \left(|v_{\pm}^{(k)}| + |v_{\pm}^{(j)}| \right), \\ \dot{\rho}_{boun}^{(k)} &= \sum_{j=1}^J f(S_{boun}^{(i,j)}, \rho_{boun\pm}^{(m,n)}, \mathbf{n}_{boun}^{(i,j)} \dots), \\ \dot{\rho}_{out\pm}^{(k)} &= \sum_{j=1}^J \phi_{out\pm}^{(k)} \cdot \mathbf{n}_{boun}^{(i,j)} \frac{S_{boun}^{(i,j)}}{V_i}, \quad \dot{\rho}_{in\pm}^{(k)} = \sum_{j=1}^J \phi_{in\pm}^{(k)} \cdot \mathbf{n}_{boun}^{(j,i)} \frac{S_{boun}^{(j,i)}}{V_i} \end{aligned}$$

Эволюционное уравнение скорости изменения плотности дислокаций за счет зарождения новых дислокаций, аннигиляции и межкристаллитных потоков дислокаций.

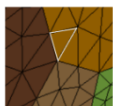
Структура модели



- В структуре модели выделяются уровень для описания упругого и пластического деформирования и Уровень описания движения и эволюции плотности дислокаций.
- Элементом моделирования является кристаллит (часть зерна).
- Дислокации распределены однородно по плоскостям каждой СС в пределах элемента

Элемент моделирования
– субзерно, кристаллит

Уровень описания упругого и пластического деформирования (мезо-I)

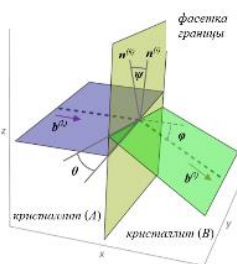


Уровень описания движения и эволюции плотности дислокаций (мезо-II)

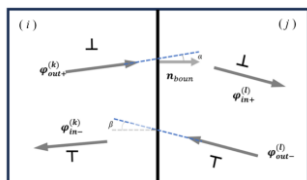
Континуально-микромеханические
параметры:
плотности и скорости движения
дислокаций.

Континуально-механические
параметры:
скорости сдвигов, напряжения и
деформации.

Экспериментальные наблюдения показали, что дислокации могут взаимодействовать с границами зерен различными способами – путем прямого перехода, поглощения или перехода с образованием остаточных дислокаций в границе, образованием скоплений, что может приводить к эмиссии дислокаций или зарождению трещин.



Подмодель межкристаллитных потоков дислокаций



Предполагаем, что скорость дислокаций скачком
меняется при переходе в СС соседнего элемента

Выделяем отток и приток $[m^{-1}c^{-1}]$ дислокаций в элемент через границу.
Проверка взаимного расположения СС и фасетки границы

- Определение наиболее благоприятно ориентированной СС для перехода минимизацией несовместности сдвигов
- Вычисление
 - оттока дислокаций из кристаллитов,
 - притока дислокаций в кристаллиты.
- Определение остаточной плотности дислокаций в границе.
- Вычисление скорости изменения плотности дислокаций.

Упрочнение

Отток дислокаций $[m^{-1}c^{-1}]$

$$\begin{aligned} \phi_{out+}^{(k)} &= \rho_+^{(k)} v_+^{(k)} \cos \alpha, \\ \phi_{out-}^{(l)} &= \rho_-^{(l)} v_-^{(l)} \cos \beta. \end{aligned}$$

Приток дислокаций

$$\begin{aligned} \phi_{in+}^{(l)} &= \phi_{out+}^{(l)} \min \left\{ \frac{|v_+^{(l)}|}{|v_+^{(k)}|}, 1 \right\} \hat{\mathbf{b}}_+^{(k)} \cdot \hat{\mathbf{b}}_+^{(l)}, \\ \phi_{in-}^{(k)} &= \phi_{out-}^{(k)} \min \left\{ \frac{|v_-^{(k)}|}{|v_-^{(l)}|}, 1 \right\} \hat{\mathbf{b}}_-^{(l)} \cdot \hat{\mathbf{b}}_-^{(k)}. \end{aligned}$$

Остаточные дислокации в границе

$$\begin{cases} \phi_{out+}^{(k)} - \phi_{in+}^{(l)} - \dot{\rho}_{boun+}^{(k,l)} = 0 \\ \phi_{out-}^{(l)} - \phi_{in-}^{(k)} - \dot{\rho}_{boun-}^{(l,k)} = 0 \end{cases}$$

Баланс потоков на
фасетке границы
выполняется

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_{boun+}^{(k,l)} &= \phi_{out+}^{(k)} \hat{\mathbf{b}}_+^{(k)} - \phi_{in+}^{(l)} \hat{\mathbf{b}}_+^{(l)}, \\ \dot{\rho}_{boun-}^{(l,k)} &= \phi_{out-}^{(l)} \hat{\mathbf{b}}_-^{(l)} - \phi_{in-}^{(k)} \hat{\mathbf{b}}_-^{(k)}. \end{aligned}$$

Выводы

- Предложена структура прямой дислокационно-ориентированной математической модели для описания поведения поликристаллических материалов в процессе деформирования с учетом взаимодействия дислокаций с границами зерен. Приведено описание рассматриваемых механизмов на каждом уровне.
- Разработана подмодель для описания межкристаллитных потоков дислокаций.
- Реализована программа и проведены численные эксперименты по реализации межкристаллитных потоков дислокаций.