



МНОГОУРОВНЕВОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕУПРУГОГО ДЕФОРМИРОВАНИЯ МЕТАЛЛОВ: ОПИСАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ УСТОЙЧИВЫХ МИКРОТРЕЩИН

Курмоярцева К.А.¹, Котельникова Н.В.², Волегов П.С.³, Трусов П.В.⁴

Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь, Россия
¹kurmoiarartseva.k@mail.ru, ²kotelnickova@gmail.com, ³crocinc@mail.ru, ⁴tpv@matmod.pstu.ac.ru



Цель исследования:

• Разработка прямой многоуровневой физически обоснованной математической модели, позволяющей описывать деформирование, накопление повреждений (микротрещин) и разрушение изделий из поликристаллических материалов.

Задачи исследования

- Выбор исследуемого материала. Анализ физических механизмов деформирования и разрушения и их классификация.
- Обзор существующих моделей, ориентированных на описание процессов накопления повреждений, зарождения трещин и их распространения.
- Анализ методов и результатов экспериментальных и теоретических исследований поведения материалов с повреждениями (поры, трещины).
- Выделение структурно-масштабных уровней, разработка общей структуры создаваемой модели. Математическая постановка.
- Разработка алгоритмов и специализированных программ, реализующих разработанную модель; численное моделирование деформирования и разрушения в процессе изготовления и эксплуатации металлических деталей и конструкций на основе прямой модели.

Содержательная постановка

Необходимо разработать прямую физически обоснованную математическую модель, основанную на физических теориях упруговязкопластичности и континуальном описании дислокаций на системах скольжения.

Концептуальная постановка:

Модель должна описывать

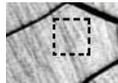
- эволюцию дислокационной субструктуры, процессы образования скоплений;
- зарождение микротрещин на основе анализа эволюции внутренней структуры;
- деформирования в широком диапазоне изменения параметров термомеханических воздействий;
- развитие и распространения микротрещин в материале.

Структура модели

- Материал рассматривается с учетом разделения на структурно-масштабные уровни с точки зрения описания различных физических механизмов деформирования материала.
- Элементом моделирования на нижнем уровне является кристаллит (часть зерна).
- Однородное распределение дислокаций по плоскостям каждой СС в пределах элемента



Уровень описания упругого и пластического деформирования (мезо-I)



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

Механизмы: пластические сдвиги по системам скольжения кристаллита, упругое искажение решетки, учет поворотов зерен
Параметры: скорости сдвигов, напряжения и деформации.

Механизмы: Скольжение, зарождение новых дислокаций, аннигиляция, приток и отток дислокаций.
Параметры: плотности и скорости движения дислокаций

Математическая постановка

Мезоуровень-I

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

Мезоуровень-II

Разделение дислокаций на положительные и отрицательные

$$\rho_{\pm}^{(k)} = \rho_{\pm}^{(k)} + \rho_{\pm}^{(k)}, \quad v_{\pm}^{(k)} = \pm v_0^{(k)} \exp\left[-\frac{\Delta F}{k\theta}\right] H(\tau^{(k)} - \tau_{ct}^{(k)}) \text{sign}(\tau^{(k)}),$$

Средняя скорость движения дислокаций на СС

$$\begin{aligned} \tau^{(k)} &= \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)} : \sigma \\ \dot{\tau}_{ct}^{(k)} &= \dot{\tau}_{dis}^{(k)} + \dot{\tau}_{bar}^{(k)} \\ \dot{\rho}_{\pm}^{(k)} &= \dot{\rho}_{mic\pm}^{(k)} + \dot{\rho}_{inflow\pm}^{(k)} - \dot{\rho}_{ann}^{(k)} - \dot{\rho}_{outflow\pm}^{(k)}, \\ \dot{\rho}_{mic\pm}^{(k)} &= f(\rho_{\pm}^{(k)}, \tau^{(k)}, \tau_{ct}^{(k)}), \\ \dot{\rho}_{ann}^{(k)} &= h_{ann} \rho_{\pm}^{(k)} \rho_{\mp}^{(k)} |v_+^{(k)} - v_-^{(k)}|, \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} (\dot{\rho}_{out\pm}^{(k)})^{(i)} &= \sum_{j=1}^J (\rho_{\pm}^{(k)})^{(j)} (v_{\pm}^{(k)})^{(j)} (\mathbf{b}^{(k)})^{(j)} \cdot \mathbf{n}_{boun(i,j)} \frac{S_{boun(i,j)}}{V^{(i)}} H(|\tau^{(k)}|^{(i)} - \tau_{boun(i,j)}^{(k)}) \\ (\dot{\rho}_{in\pm}^{(k)})^{(i)} &= \sum_{j=1}^J (\rho_{\pm}^{(k)})^{(j)} (v_{\pm}^{(k)})^{(j)} (\mathbf{b}^{(k)})^{(j)} \cdot \mathbf{n}_{boun(j,i)} \frac{S_{boun(j,i)}}{V^{(i)}} H(|\tau^{(k)}|^{(j)} - \tau_{boun(j,i)}^{(k)}), \end{aligned}$$

Потоки плотностей дислокаций

- Направление движения дислокаций $\mathbf{b}^{(k)} = \text{sign}(v_{\pm}^{(k)}) \mathbf{b}^{(k)}$
- Выбранные элементы i и j разделяет участок границы с нормалью $\mathbf{n}_{boun(i,j)}$.
- Для перерасчета потоков дислокаций необходимо найти те k -е СС, которые пересекают границу элемента $\mathbf{b}^{(k)} \cdot \mathbf{n}_{boun(i,j)} > 0$
- Отдельная задача – определение СС в соседнем зерне, в которую наиболее выгодно с точки зрения энергетики перейти дислокациям рассматриваемой СС исходного зерна.
- Рассматриваемые элементы в общем случае могут иметь разную ориентацию кристаллической решетки, в этом случае на их границе возможно образование дислокаций ориентационного несоответствия (ДОН).
- Изменение плотности дислокаций за счет оттока и притока в (i) -ом элементе обозначается следующим образом: $(\dot{\rho}_{out\pm}^{(k)})^{(i)}$ и $(\dot{\rho}_{in\pm}^{(k)})^{(i)}$.
- Для границы должно выполняться баланс притока и оттока дислокаций (с учетом ДОН).

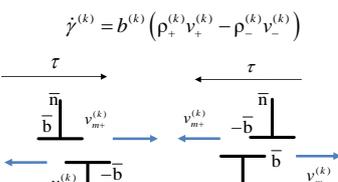
Учет зарождения микротрещин.

Введение фиктивных сил

- Критическое состояние элемента; «разрушенный» элемент – это объем материала с трещиной, теряющий способность воспринимать нагрузки.
- Критерием разрушения элемента может быть достижение критического значения плотностей дислокаций на одной из СС (скопление дислокаций).
- В дальнейшем введение анизотропного разрушения – в базе главных осей тензора напряжений будут различные свойства (растягивающие напряжения нивелируются, сжимающие нет).

Результаты

На кафедре ММСП ПНИПУ разработан комплекс программ, предназначенный для решения задач исследования процессов термомеханической обработки металлов. В созданном комплексе программ реализовано ядро математической модели, включающей основные определяющие соотношения. Структура комплекса предполагает возможность его расширения, модификации конститутивной модели, учета различных механизмов деформирования и физических эффектов (в зависимости от строения материала и условий нагружения).



Нагружение кристаллита с ГЦК структурой сдвигом XZ

Параметры:

Время расчета 10^3 с, шаг по времени $t = 0.3$ с, кватернион ориентации $\{-0.64 \ 0.52 \ 0.36 \ -0.43\}$.
 Параметры материала
 $\Pi_{1111} = 200.0$ ГПа, $\Pi_{1122} = 137.0$ ГПа,
 $\Pi_{2211} = 116.0$ ГПа, $\Pi_{1212} = 116.0$ ГПа.
 Критические напряжения в СС, 0.015 ГПа

$$\begin{aligned} \rho_{\pm}^{(k)} &= \rho_{\pm}^{(k)} + \rho_{\pm}^{(k)}, \\ \dot{\rho}_{\pm}^{(k)} &= \dot{\rho}_{mic\pm}^{(k)} - \dot{\rho}_{ann}^{(k)}, \\ v_{\pm}^{(k)} &= \pm v_0^{(k)} \frac{\tau^{(k)}}{\tau_{ct}^{(k)}} H(|\tau^{(k)}| - \tau_{ct}^{(k)}) \text{sign}(\tau^{(k)}), \\ \dot{\rho}_{mic\pm}^{(k)} &= h_{mic\pm} \rho_{\pm}^{(k)} \rho_{\mp}^{(k)} |v_+^{(k)} - v_-^{(k)}|, \\ \dot{\rho}_{ann}^{(k)} &= h_{ann} \rho_{\pm}^{(k)} \rho_{\mp}^{(k)} |v_+^{(k)} - v_-^{(k)}|. \end{aligned}$$

Основные соотношения эволюции плотностей дислокаций

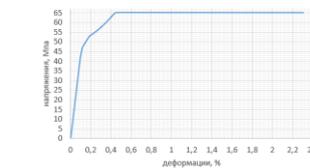


Рисунок 1 Зависимость интенсивности напряжений от интенсивности накопленных деформаций.

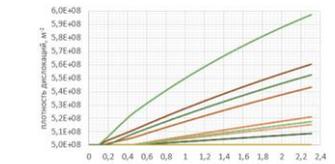


Рисунок 2. Зависимость плотностей дислокаций от интенсивности накопленных деформаций.

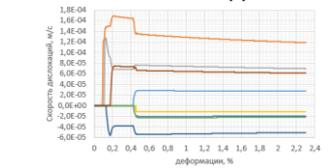


Рисунок 3 Зависимость скорости движения положительных дислокаций от интенсивности накопленных деформаций.

Выводы

- Предложена структура прямой дислокационно-ориентированной математической модели для описания поведения поликристаллических материалов в процессе деформирования (включая разрушение). Приведено описание рассматриваемых механизмов на каждом уровне.
- Предложен способ описания элементов, в которых образовалась микротрещина.
- Реализовано описание эволюции дислокационной субструктуры за счет механизмов аннигиляции и зарождения новых дислокаций.
- Планируется реализовать расчеты потоков плотностей дислокаций для нахождения областей, в которых возможно зарождение микротрещин.