

01:05

Моделирование произвольной деформации поликристаллов методом клеточных автоматов

© Я.Е. Бейгельзимер, А.В. Спусканюк, В.Н. Варюхин, Б.М. Эфрос

Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина НАН Украины, Донецк, Украина

(Поступило в Редакцию 13 октября 1997 г.)

Разработана компьютерная модель деформации поликристаллов, основанная на концепции клеточных автоматов. Модель позволяет исследовать поликристалл как многоуровневую иерархическую систему и изучать особенности поведения этой системы в зависимости от структуры материала, механизмов деформации на нижних уровнях, программы нагружения и/или деформирования на верхнем уровне, температуры и других параметров.

1. В настоящей работе мы предлагаем вариант модели деформируемого поликристалла, основанный на клеточном автомате [1,2]. Суть концепции клеточных автоматов состоит в том, что область исследования представляется равномерной сеткой, каждая ячейка которой, или клетка, содержит несколько битов данных; время идет вперед дискретными шагами, а законы поведения системы выражаются единственным набором правил (например, небольшой справочной таблицей), по которым любая клетка на каждом шаге вычисляет свое новое состояние по состояниям ее близких соседей. В работе [3] для моделирования деформирования твердых тел предлагается использовать метод подвижных клеточных автоматов.

Оригинальным решением авторов является самоподобная структура клеточного автомата, позволяющая сразу же отразить в модели фрактальную структуру реальных материалов (известно, например, что структура реальных сталей представляет собой фрактал [4]). Кроме того, самоподобная структура адекватно реализуется методами объектно-ориентированного программирования, что позволило использовать для численных экспериментов самые последние разработки языков программирования, обеспечивающие высокое быстродействие и рациональное распределение оперативной памяти компьютера, наглядность программирования, возможность легкой модификации на новые механизмы деформации и структуры материалов.

2. Строение реального поликристалла [4] мы моделируем с помощью трехмерной клеточной структуры. Клетки могут быть простыми и сложными. Простые клетки не имеют внутренней структуры, сложные состоят из простых и/или сложных. В качестве составляющих сложная клетка может содержать себе подобные, что позволяет моделировать фрактальные структуры.

В настоящей работе использованы сложные клетки, имеющие структуру кубической решетки и состоящие из 27 ($3 \times 3 \times 3$) клеток меньших размеров (рис. 1). В общем случае возможны другие пространственные структуры и иное количество составляющих.

Введем в рассмотрение окрестность клетки, под которой будем понимать множество ее ближайших соседей, и присвоим каждой клетке координаты (m, n, k) , определяющие ее положение (m, n, k — целые от 1 до 3). Центральная клетка на рис. 1 имеет координату $(2, 2, 2)$, а окрестность ее составляют все остальные 26 клеток. При определении окрестности граничных клеток полагаем, что система клеток на рис. 1 со всех сторон окружена себе подобными. В этом состоит так называемые периодические граничные условия, согласно которым получается, что окрестность каждой из 27 клеток образуют оставшиеся 26 клеток.

3. Нагруженный поликристалл характеризуется неоднородным напряженно-деформированным состоянием (НДС). С целью его описания введем в рассмотрение тензоры напряжений σ^n и пластических деформаций e_p^n для каждой клетки из предложенной выше структуры. Индекс n в приведенных обозначениях указывает на уровень, которому принадлежит рассматриваемая клетка. При этом принимается, что самая большая клетка, которая моделирует представительный объем макроскопического уровня, относится к уровню 1; составляющие ее 27 клеток относятся к уровню 2; составляющие каждой из этих 27 клеток относятся к уровню 3 и т.д. Очевидно, что на уровне с номером n имеется 27^{n-1} клеток.

Так как пластическая деформация клетки n -го уровня обусловлена пластическими деформациями составляющих ее клеток $(n + 1)$ -го уровня, то полагаем

$$e_p^n = \langle e_p^{n+1} \rangle, \quad (1)$$

где угловые скобки означают осреднение по объему клетки n -го уровня.

В дальнейшем в работе используются обозначения прямого тензорного исчисления.

Предполагаем, что тензоры напряжений и пластических деформаций клетки уровня n и составляющих ее 27 клеток уровня $n + 1$ связаны соотношением Кренера

$$\sigma^{n+1} - \sigma^n = M(e_p^n - e_p^{n+1}), \quad (2)$$

где M в общем случае — тензор 4-го ранга.

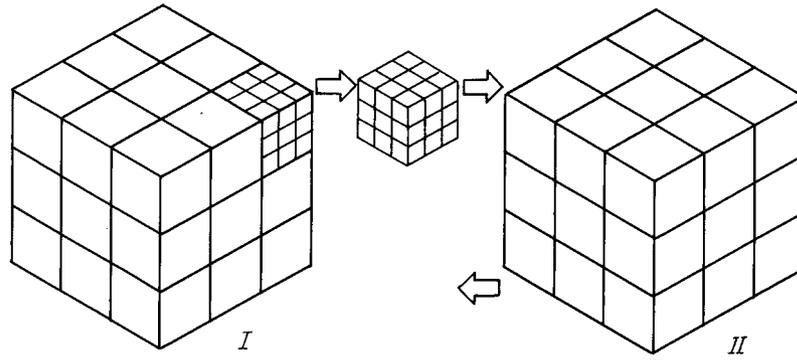


Рис. 1. Структура клеточного автомата. Клетка 1-го уровня (I) равна 27 меньшим клеткам 2-го уровня (II).

В данной работе мы полагаем M скалярной величиной, в последующем будем называть его параметром accommodations, смысл названия будет ясен при обсуждении результатов компьютерных экспериментов.

Последнее соотношение показывает, что отличие пластической деформации какой-либо клетки уровня $n + 1$ от среднего значения этой деформации в пределах соответствующей клетки n -го уровня приводит к возникновению внутренних микронапряжений, стремящихся выровнять эти деформации. При этом происходит перераспределение напряжений в пределах клетки n -го уровня и внутри сложных клеток возникает неоднородное НДС.

Соотношение (1) позволяет найти пластическую деформацию сложных клеток через пластическую деформацию их составляющих. Пластическая деформация простых клеток определяется действующим в них механизмом деформации.

В частности, для пластической деформации, осуществляемой посредством скольжения дислокаций, величина скорости пластической деформации вычисляется путем суммирования составляющих, обусловленных всеми действующими в пределах клетки системами скольжения. В этом случае при малых упругопластических деформациях величина $\dot{\epsilon}_p$ вычисляется по формуле

$$\dot{\epsilon}_p = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{\alpha} (s^{\alpha} m^{\alpha} + m^{\alpha} s^{\alpha}), \quad (3)$$

где m^{α} и s^{α} — соответственно векторы нормали к плоскости скольжения и направления скольжения в системе α ; $\dot{\gamma}^{\alpha}$ — скорость сдвиговой деформации в системе α .

Величина $\dot{\gamma}^{\alpha}$ определяется касательными напряжениями τ^{α} , действующими в системе α . Величина τ^{α} рассчитывается обычным образом по тензору напряжений соответствующей клетки

$$\tau^{\alpha} = m^{\alpha} s^{\alpha} : \sigma^{\alpha}. \quad (4)$$

Соотношения, связывающие $\dot{\gamma}^{\alpha}$ с τ^{α} для различных механизмов, контролирующих движение дислокаций, приведены в целом ряде публикаций по физике пла-

стической деформации, в частности, согласно Эшби [5],

$$\dot{\gamma}^{\alpha} = \dot{\gamma}_0^{\alpha} \exp \left(-\frac{\Delta F}{kT} \left(1 - \left(\frac{\tau^{\alpha}}{\tau_c^{\alpha}} \right)^p \right)^q \right), \quad (5)$$

где ΔF — энергия активации, необходимая для преодоления препятствий в отсутствие внешних напряжений; τ_c^{α} — критическое касательное напряжение для системы α ; p и q — параметры, зависящие от механизма, контролирующего движение дислокации ($0 \leq p \leq 1, 1 \leq q \leq 2$); k — постоянная Больцмана; T — температура; $\dot{\gamma}_0^{\alpha}$ — некоторый параметр, характеризующий систему α .

Согласно концепции клеточных автоматов, процесс формирования НДС исследуем в дискретном времени t_m с шагом дискретизации Δt ($t_m = m\Delta t$, где m — целое). На верхнем уровне задаем зависимость действующего напряжения от времени $\sigma^1 = \sigma^1(t_m)$. В начальный момент времени ($m = 0$) полагаем, что пластические деформации e_p^{α} равны 0 на всех уровнях.

Соотношение (2) запишем в несколько модифицированном виде

$$\sigma^{n+1}(t_m) - \sigma^n(t_m) = M (e_p^n(t_{m-1}) - e_p^{n+1}(t_{m-1})), \quad (6)$$

что позволит рассчитывать клеточные напряжения в момент времени t_m по пластическим деформациям в предыдущий момент времени t_{m-1} .

Соотношения (1)–(6) дают возможность определять напряженно-деформированное состояние поликристалла по заданной программе нагружения на верхнем уровне.

Если задается программа деформирования материала на верхнем уровне, т.е. задается тензор полных деформаций $e^1 = e^1(t_m)$, то величина $\sigma^1(t_m)$ определяется по

Программа сложного деформирования

№ шага	e_{xx}	e_{yy}	e_{zz}	e_{xy}	e_{yz}	e_{zx}
1	0	0	0	0	0	0
2	0.005	-0.005	0	0	0	0
3	0	0	0	0	0	0
4	0	0	0	0.005	0	0

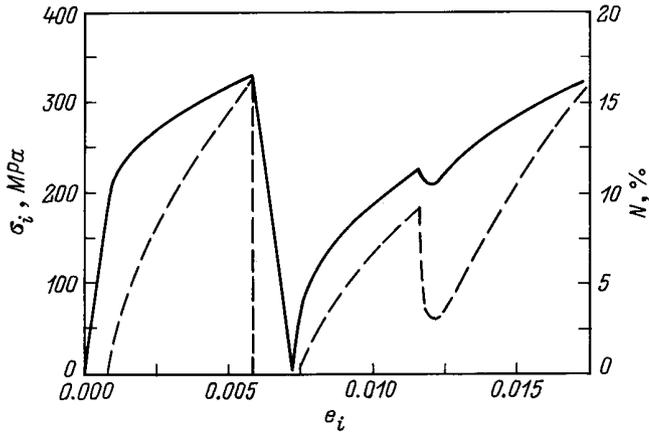


Рис. 2. Кривая упрочнения и доля пластифицированных элементов N при сложном нагружении поликристалла α -Fe: сплошная кривая — σ , штриховая — N .

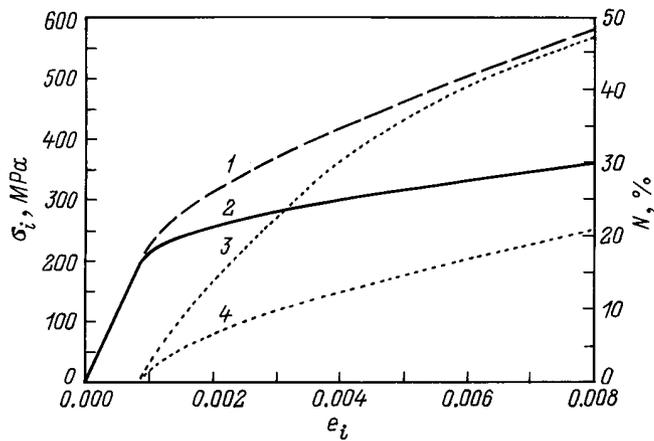


Рис. 3. Влияние коэффициента аккомодации M на кривую упрочнения и количество пластифицированных элементов N (1, 2 — σ ; 3, 4 — N ; $M = 2, 4 - 1000$; 1, 3 — 5000 МПа).

закону Гука

$$\sigma^1(t_m) = E : e_e^1(t_m) \quad (7)$$

в зависимости от упругой деформации $e_e^1(t_m)$, где E — тензор модулей упругости.

Величину упругой деформации находим по формуле

$$e_e^1(t_m) = e^1(t_m) - e_p^1(t_{m-1}). \quad (8)$$

Соотношения (1)–(8) дают возможность определять напряженно-деформированное состояние поликристалла по заданной программе деформирования на верхнем уровне.

4. В качестве примера приведем результаты экспериментов по компьютерному моделированию сложного деформирования поликристаллов α -железа. Параметры формулы (5) взяты из книги Эшби [5]: $\Delta F = 0.5\mu_0 b^3$, $b = 2.48 \cdot 10^{-10}$ м — модуль вектора Бюргерса, $\mu_0 = 6.4 \cdot 10^{10}$ Па — модуль сдвига, $\tau_c = 1.7 \cdot 10^{-3} \cdot \mu_0$.

На рис. 2 показана расчетная кривая упрочнения при программе деформирования поликристалла, показанной в таблице.

В таблице e_{ij} — компоненты тензора полной деформации макроэлемента материала (клетки 1-го уровня). Обращает на себя внимание следующее. При разгрузке и нагружении в обратном направлении (шаг 3) проявляется эффект Баушингера. При деформировании путем сдвига на шаге 4 происходит временная разгрузка материала, после чего кривая упрочнения выходит на продолжение кривой предыдущего шага. В этом проявляется известный эффект единой кривой упрочнения.

На рис. 3 приведены результаты расчетов по деформированию в направлении 2-го шага из таблицы при различных значениях параметра M формулы (2). Согласно этой формуле, физический смысл M заключается в учете способности структурных элементов к аккомодации друг к другу. Чем больше M , тем меньше способность к аккомодации, т.е. тем сильнее реакция окружения на "чужака". Из рис. 3 следует, что чем выше M , тем при прочих равных условиях выше идет кривая упрочнения.

Список литературы

- [1] Тоффали Т., Марголус Н. Машины клеточных автоматов / Пер с англ. М.: Мир, 1991. 280 с.
- [2] Preston K., Duff M. Modern Cellular Automata. Theory and Applications. Plenum Press, 1994. 327 p.
- [3] Псахье С.Г., Смолин А.Ю., Коростелёв С.Ю. и др. // Письма в ЖТФ. 1995. Т. 21. Вып. 20. С. 72–76.
- [4] Hornbogen E. // Prakt. Met. 1986. Vol. 23. P. 258–267.
- [5] Frost H.J., Ashby M.F. Deformation — Mechanisms Mars. Pergamon Press, 1982. 425 p.