

01;05

Формализация моделей деформируемого поликристаллического материала в терминах мезомеханики

© В.В. Осташев, О.Д. Шевченко

Псковский политехнический институт — филиал Санкт-Петербургского государственного технического университета, 180680 Псков, Россия

(Поступило в Редакцию 15 июня 2001 г.)

Этап формализации является необходимым условием создания адекватной математической модели любого явления. На примере деформируемого поликристаллического материала показано, что в основе алгоритма формализации лежит замкнутая схема определений, представляющая исследуемый материал как систему открытую, нелинейную динамическую, грубую, многоуровневую иерархическую, диссипативную самоорганизующуюся, информационную. На поликристаллических материалах с ГКЦ решеткой (медь МО, аустенитная сталь 08X18H10T) проведено экспериментальное подтверждение принципов формализации моделей пластической деформации при статическом нагружении.

1. Общие положения

Описание процессов пластической деформации поликристаллического материала на мезоуровне в первую очередь требует качественной формализации их математических моделей, предъявляет определенные требования к строгости используемой терминологии и основным определениям. В общем случае алгоритм формализации определяется как отображение физической модели на математическую и обратно.

Известно, что ключевыми, наиболее обсуждаемыми и дискуссионными в мезомеханике являются понятия: геометрический образ деформационного дефекта, структурные уровни деформации, диссипативные структуры, представительный объем. Физические представления о механизмах пластической деформации на мезоуровне сформулированы в работах авторов мезомеханики [1,2]. В общем случае они сводятся к нескольким моментам.

1. Ведущим механизмом деформации является первичное скольжение, которое всегда порождает первичный материальный поворот. Все остальные механизмы деформации являются аккомодационными, обеспечивающими релаксацию поля поворотных моментов, действующих на структурный элемент деформации со стороны окружающего материала.

2. Аккомодационные механизмы деформации осуществляются вторичными потоками дефектов и могут обуславливать как материальный поворот (множественное скольжение), так и кристаллографический поворот структурного элемента деформации (зернограничное скольжение, миграция зерен, фрагментация).

3. Органическая связь сдвигов и поворотов приводит к тому, что элементарным актом пластической деформации в мезомеханике является не сдвиг, а трансляционно-ротационный вихрь (ТРВ) различных масштабов.

В рамках этого подхода деформируемый поликристаллический материал на мезоуровне рассматривается как ансамбль взаимодействующих элементов-мезодефектов, которые обладают определенными геометрическими раз-

мерами и отделены друг от друга границами. Эволюция моделируемой системы определяется динамическим состоянием мезодефектов, их механическими характеристиками и взаимодействием внутри представительного объема. Взаимодействие подвижных мезодефектов приводит к образованию диссипативных структур, как правило, корреляционного типа, однако функциональное упорядочение способствует образованию и геометрических структур, характерных для мезоуровня, т.е. мезодефекты, содержащие как сдвиговую, так и поворотную компоненты деформации, делают возможным перемещение в деформируемом твердом теле объемных структурных элементов различного масштаба: субзерен, зерен, их конгломератов, протяженных блоков материала.

2. Принципы формализации

Таким образом, в основе моделей физической мезомеханики лежит описание нелинейных взаимодействий крупномасштабных деформационных дефектов, называемых мезодефектами, а сам деформируемый материал относится к системам открытым, нелинейным динамическим, грубым, многоуровневым иерархическим, диссипативным самоорганизующимся, информационным.

Открытая система всегда предполагает массоперенос в процессе деформирования, обмен энергией и информацией в потоках деформационных дефектов. Наличие потоков обмена, достаточная интенсивность этих потоков является необходимым условием возникновения упорядоченных пространственно-временных структур. Система, захватывая потоки обмена, даже если они некоторым образом структурированы, трансформирует, организует их, навязывает им свою собственную пространственно-временную структуру. По существу это способ организации деформируемым материалом своей структуры, т.е. самоорганизация. Можно заключить, что деформируемый кристаллический материал адаптируется к условиям нагружения степенью открытости системы. Количественную характеристику материала как открытой системы

можно дать на основе уравнения баланса энтропии

$$\frac{ds}{dt} = \frac{ds_i}{dt} + \frac{ds_e}{dt}, \quad (1)$$

где каждый член соответственно скорость образования энтропии в открытой системе, скорость образования энтропии в системе за счет внутренних необратимых процессов, скорость обмена энтропией с внешней средой, причем ds_i/dt , по определению, всегда положительна, а ds_e/dt может быть положительной и отрицательной.

Нелинейность поликристаллического материала при внешнем воздействии выражается в свойствах его как системы, имеет целый спектр возможных стационарных состояний. Динамическая система определяется как процесс или объект, начальное состояние которого определяется совокупностью параметров, и всегда есть оператор, описывающий поведение системы во времени и пространстве.

Нелинейные динамические системы отличаются от строго детерминированных тем, что в них возникает поведение, сходное со случайным. Этот феномен называется динамическим хаосом. Динамический хаос в системе есть следствие не случайных внешних воздействий, а результат внутренних взаимодействий в системе, порождается собственной динамикой нелинейной системы. Хаос (как внутреннее свойство системы) возникает почти при всех условиях деформирования. И если мы его не всегда обнаруживаем, то лишь потому, что либо он возникает в очень узкой области параметров, либо проявляется на очень больших временах, либо вуалируется другими, более сильными процессами.

Поликристаллический материал, как грубая система, характеризуется способностью сохранить устойчивость параметров геометрической структуры и инвариант структуры функциональных отношений между динамической и статистической составляющей системы. Очевидно, что любое динамическое решение, любое упорядочение в структуре с точки зрения статистического подхода является флуктуацией. Таким образом, неустойчивость динамических состояний означает устойчивость статистических. Верно и обратное утверждение — устойчивость динамических решений означает отсутствие релаксации флуктуаций и, следовательно, неустойчивость статистической составляющей.

Под иерархической многоуровневой системой понимается совокупность структур различных уровней иерархии. Корректная структуризация нелинейных систем — одна из самых сложных задач при моделировании микропластических деформаций. В основе лежит принцип идентификации неразличимости состояния, введенный Лейбницем. В приложении к рассматриваемой проблеме он формулируется так: деформационные дефекты, определяющие один структурный уровень, в своем развитии и взаимодействии должны обладать настолько похожими свойствами, чтобы быть неразличимыми при аналитической обработке по данной методике. Принято выделять

три масштабных уровня: макроуровень, мезоуровень, микроуровень. Иерархическая структура мезоуровня в свою очередь может быть представлена структурными уровнями по такому принципу. Деформируемый поликристаллический материал — это множество U его структурных уровней и множество R связей (отношений) между ними. Пара множеств U и R делится на подсистемы низшего уровня, динамика которых определяется взаимодействием мезодефектов в представительском объеме. При этом на каждом следующем уровне мезодефектами являются системы предыдущего уровня, т.е. распределение мезодефектов по уровням отображается системой вложенных множеств,

$$U_j(R_j) \rightarrow U_{j+1}(R_{j+1}) \rightarrow U_{j+2}(R_{j+2}) \rightarrow SS. \quad (2)$$

К диссипативным самоорганизующимся системам относятся открытые нелинейные неравновесные системы, в которых благодаря потоку, поступающему в системы и распространяющемуся в ней, через диссипацию (рассеяние) могут активизироваться новые структуры. Основные предпосылки возникновения самоорганизации в диссипативных системах: поток энергии или информации извне, обусловленный открытостью системы; неравновесность системы, способствующая усилению флуктуаций до такой степени, при которой хаос создает порядок; наличие потенциальности, допускающей обмен устойчивостью между содержащимися в ней структурами. Необходимость возникновения диссипативных структур в процессе деформации можно видеть в действии общих термодинамических принципов.

Представление деформируемого поликристаллического материала информационной системой основано на концептуальной идее существования материи и энергии в виде производного продукта, возникающего в процессе передачи и накопления информации [3,4]. Не претендуя на строгое определение понятия "информация", подчеркнем три ее наиболее общих свойства: информация не может существовать вне взаимодействия объектов — деформационных дефектов в нашем случае; информация не теряется ни одним из них в процессе этого взаимодействия; в результате взаимодействия образуется новая сложная система, в которой могут возникать новые информационные качества, отсутствующие в исходных системах.

Таким образом, в приложении к рассматриваемой проблеме любое взаимодействие между деформационными дефектами, в процессе которого один приобретает информацию, а другой ее не теряет, называется информационным взаимодействием. Информационные взаимодействия — это несимметричные взаимодействия. Концептуально выделяем связанную и переданную информацию. Связанная, или структурная, информация $C(S)$ определяется совокупностью статистических данных о состоянии мезодефектов на каждом структурном уровне. Связанная информация — есть мера структурной сложности мате-

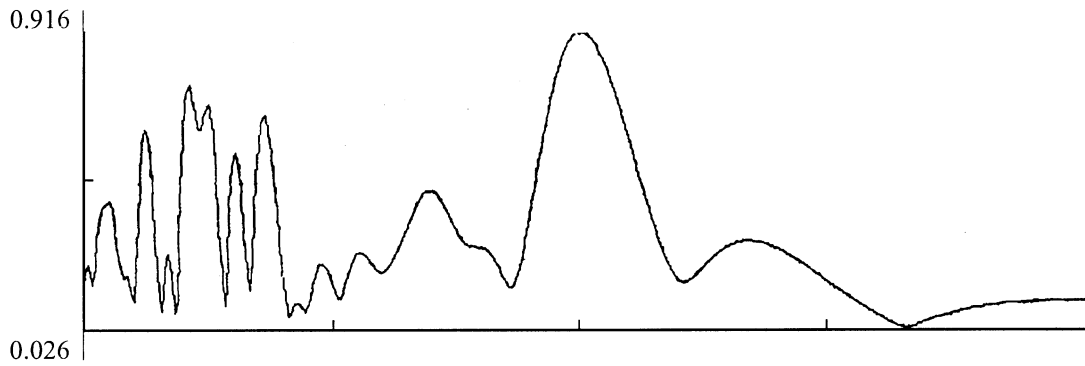


Рис. 1. Пример периодограммы линейных микропластических деформаций. Материал медь МО со средней деформацией 2%.

риала при деформации

$$C(S) = -(f_1 \lg f_1 + f_2 \lg f_2 + f_n \lg f_n) = - \sum f_k \lg f_k, \quad (3)$$

f_k — параметры частотного распределения моды деформации для мезодефектов расчетного структурного уровня.

Переданная деформация $I(S)$ представляется как отображение связанной информации на нижнем уровне на структуру более высокого иерархического уровня и определяется как условная информация

$$I(S) = - \left[\sum f_k(\varepsilon) \lg f_k(\varepsilon) - \sum f_{k\omega}(\varepsilon) \lg f_{k\omega}(\varepsilon) - \sum f_{ky}(\varepsilon) \lg f_{ky}(\varepsilon) \right], \quad (4)$$

$\sum f_k(\varepsilon) \lg f_k(\varepsilon)$ — связанная информация на расчетном структурном уровне; $\sum f_{k\omega}(\varepsilon) \lg f_{k\omega}(\varepsilon)$, $\sum f_{ky}(\varepsilon) \times \lg f_{ky}(\varepsilon)$ — определяемая линейной пластической деформацией условная информация, зависящая от реализации сдвигового и поворотных механизмов деформации.

3. Экспериментальные основы

Экспериментальное подтверждение принципов формализации, обсуждаемых в данной работе, основано на исследовании полей смещения узлов делительной сетки, нанесенное непосредственно на деформируемый образец. Геометрическим образом мезодефекта на нижнем структурном уровне является ячейка делительной сетки размером $10 \mu\text{m}$. Более грубые структурные уровни характеризуются набором модельных материалов (медь МО) при статическом деформировании и различных условиях испытания (величина зерна материала, скорость нагружения, рабочая длина образца, жесткость испытательной машины). Методом математического планирования постановкой факторного эксперимента 2^4 определены образцы с контрастными механическими свойствами: максимальными характеристиками пластичности, прочности и комплексом характеристик. Поле смещений

численным дифференцированием преобразуется в поле дисторсии $\beta_{ij} = \varepsilon_{ij} + \omega_{ij}$. Для плоского случая по формулам Коши рассчитываются все компоненты тензора β_{ij} симметричной и антисимметричной составляющих.

Линейные, сдвиговые и поворотные составляющие микропластических деформаций для ячейки делительной сетки размером i , определенные по ансамблю мезодефектов, на длине x описываются некоторыми случайными функциями $\varepsilon_{ij}(x_i|e_j)_i$, где $i = 10, 20, \dots, 120 \mu\text{m}$, j — средняя деформация.

Отличительной чертой микропластических деформаций на мезоуровне является их осциллирующий характер и неоднородность распределения по длине. Они могут быть представлены как относительно-периодические процессы, удовлетворяющие общему определению [5],

$$|\varepsilon_i[x + T(x)] - \varepsilon_i(x)| \leq \varepsilon, \quad \varepsilon > 0. \quad (5)$$

Процесс на данном структурном уровне описывается рядом динамических составляющих $Y_i(x)$ вида (1) и случайных величин $R(x)$, характеризующих взаимосвязи мезодефектов внутри уровня,

$$H(x) = \sum_n^1 Y_i(x) + R(x). \quad (6)$$

На основе такого представления резонансно-поисковым методом рассчитаны периодограммы для линейных, сдвиговых и поворотных мод для четырех дискретных деформаций в условиях факторного эксперимента. Каждая периодограмма характеризует количество гармонических составляющих определенной длины волны и амплитуды в спектре соответствующей деформации. Фазовая диаграмма строится в координатах оператор M –оператор N , бифуркационная диаграмма — в координатах микропластическая деформация–период. Методом скользящего частотного ”окна” устанавливаются все присутствующие на фазовой диаграмме бифуркации и границы, разделяющие области притяжения различных аттракторов [6].

По периодограммам случайных функций $\varepsilon_{ij}(x_i|e_j)_i$ рассчитывали коэффициент синхронизации для набора

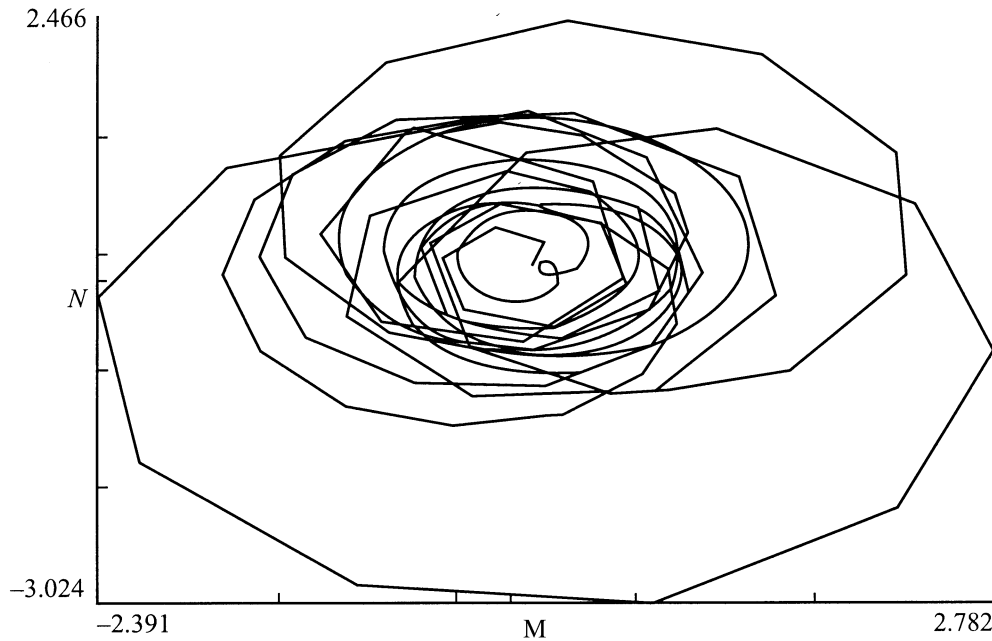


Рис. 2. Пример фазовой диаграммы для сдвиговой моды деформации. Материал медь МО со средней деформацией 2%.

деформационных дефектов, отождествляемых с размерами ячейки делительной сетки от 10 до 120 μm [7,8].

Статистическая обработка предусматривала определение закона распределения микропластических деформаций, расчет автокорреляционных функций, тесты на стационарность и эргодичность случайных функций $\varepsilon_{ij}(x_i|e_j)_i$.

4. Обсуждение результатов

Имея набор периодограмм, состояние деформированного поликристаллического материала на каждом уровне можно характеризовать как динамический процесс эволюции распределения частот. При этом материал как нелинейная система имеет спектр нереализованных, но реализуемых стационарных состояний. Анализ периодограмм трансляционных и ротационных мод деформации показывает, что частотный спектр в процессе деформации меняется — появление и/или исчезновение гармоник спектра характерно только для нелинейных систем (рис. 1). По периодограммам можно выделить два этапа самоорганизации — дивергентный и конвергентный. Аналитически дивергентный этап сопровождается увеличением числа гармоник в спектре, конвергентный — уменьшением.

Совместный анализ фазовых диаграмм для линейных, поворотных и сдвиговых мод деформации в материале как динамической системе показывает, что диссипативные структуры развиваются в определенной последовательности, проявляются в виде сочетания бифуркаций различной коразмерности, регулярных и хаотических аттракторов. Качественная перестройка фазового пор-

трета представляется бифуркацией, а установившееся движение — аттрактором. В этих терминах для поликристаллического материала, деформированного в разных условиях, можно указать общие закономерности и отличительные черты.

Деформированный материал может быть представлен как грубая система, т.е. топологическая структура фазовой диаграммы устойчива в некотором диапазоне изменения деформации, а при достижении критического значения происходит бифуркация по одной из мод деформации.

Устойчивость диссипативных структур, например, для условий максимальной пластичности поддерживается за счет строго динамического процесса сдвиг–поворот–сдвиг, так что в любой момент по одной из мод деформации (сдвиговой или поворотной) на фазовой диаграмме сохраняется устойчивый предельный цикл (рис. 2).

По топологической структуре фазовых диаграмм на разных уровнях можно говорить о выполнении принципа масштабной инвариантности, что позволяет судить об устойчивости диссипативных структур.

Существенное различие представительского объема для условий максимальной пластичности и максимальной прочности, что говорит о более однородном развитии пластических деформаций.

Целесообразную деятельность всей сложной системы взаимодействующих деформационных дефектов на каждом структурном уровне обеспечивает принцип синхронизации. Под синхронизацией понимаем наиболее общий случай установления определенных частотных соотношений между отдельными деформационными дефектами и группами дефектов. Количественной мерой

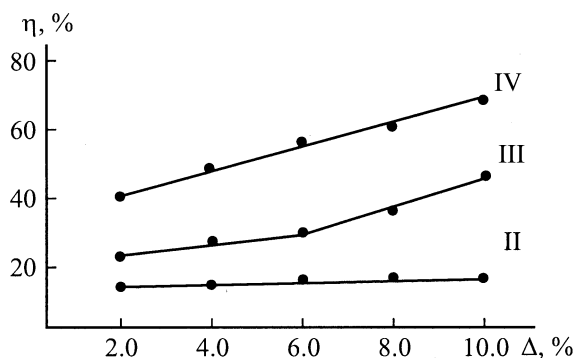


Рис. 3. Графическое определение структурных уровней по изменению коэффициента синхронизации (η) от средней деформации (Δ). Размер дефекта, μm : IV — 10–20; III — 40–60; II — 80–120.

синхронизации является коэффициент синхронизации (КС) [2]. КС рассчитывался по периодограммам линейных микропластических деформаций для набора деформационных дефектов, отождествляемых с размерами ячейки делительной сетки от 10 до 20 μm .

По закономерностям изменения КС деформационные дефекты можно разбить на три группы и задать иерархию структурных уровней: IV — уровень внутризеренных пластических деформаций, размер дефекта 10, 20 μm ; III — уровень межзеренных пластических деформаций, размер дефекта 40, 60 μm ; II — уровень взаимодействия групп зерен как целого, 80, 120 μm (рис. 3). Структуризация по КС показывает пространственно-временной характер развития процессов пластической деформации. Синхронизация, или возникновение когерентности, — это механизм самоорганизации.

Вообще говоря, в синергетике понятие диссипативной структуры отражает именно устойчивые результаты самоорганизации, а универсальность этого понятия состоит в том, что появляется возможность замены геометрических характеристик информационно-числовыми аналогами.

Таким образом, представления синергетики позволяют говорить о единой системе формализации всех известных моделей пластической деформации поликристаллов на мезоуровне.

Список литературы

- [1] Панин В.Е. Физическая мезотехника и компьютерное конструирование материалов. Новосибирск: Наука, 1995. Т. I, II.
- [2] Лихачев В.А., Панин В.Е., Зосимчук Е.Э. Кооперативные деформационные процессы и локализация деформации. Киев: Наукова думка, 1989. 320 с.
- [3] Рыбин В.В. Большие пластические деформации и разрушение металлов. М.: Металлургия, 1986. 224 с.
- [4] Беркович С.Я. Клеточные автоматы как модель реальности. Поиск новых представлений физических и информационных процессов. М., 1993.

- [5] Серебрянников М.Г., Первозванский А.А. Выявление скрытых периодичностей. М.: Наука, 1965.
- [6] Шевченко О.Д., Остаев В.В., Федюкин В.К. // Труды ППИ № 2. 1998. С. 142–147.
- [7] Остаев В.В., Шевченко О.Д. // Материалы XXXV семинара "Актуальные проблемы прочности". Механизмы деформации и разрушения перспективных материалов. Псков, 1999. Ч. II. С. 433–435.
- [8] Остаев В.В., Шевченко О.Д. // Письма в ЖТФ. 1998. Т. 25. Вып. 16. С. 50.