

Двумерное моделирование пластической деформации в матрице металлокерамического композита на мезоуровне: оценка напряженных состояний и численных методов

И.Ю. Смолин, Э. Соппа¹, З. Шмаудер¹, П.В. Макаров

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, 634021, Россия

¹Государственный институт испытания материалов при Штутгартском университете, Штутгарт, D-70569, Германия

Статья посвящена численному моделированию развития пластической деформации в пластичной матрице металлокерамического композита. Для двумерных численных исследований была выбрана искусственная мезоструктура, состоящая из керамического включения в окружающей поликристаллической матрице. Особый интерес представляло сравнение результатов расчетов, полученных разными компьютерными программами с применением разных расчетных сеток, а также для различных условий: плоского деформированного и плоского напряженного состояний. Результаты расчетов анализируются и обсуждаются, используя различное представление выходных данных.

1. Введение

Интерес к изучению композитов с металлической матрицей в последние годы очень высок. Это вызвано как особенностями механических свойств этих материалов, так и расширением сферы их применения в промышленности. Интерес к моделированию поведения этих материалов вызван также углубленным пониманием процессов деформации и разрушения материалов и современным прогрессом в компьютерной технике.

Обычно при численном изучении металлокерамических композитов предметом исследований является влияние расположения и формы упрочняющих включений на напряженно-деформированное состояние и поведение материала. Ранее методом конечных элементов было промоделировано поведение идеализированных и реальных микроструктур [1–6]. Для более полного понимания механизмов деформации и разрушения этих материалов, исследования проводятся на разных масштабных уровнях [5, 6]. Особый интерес вызывают исследования на мезоуровне, где учитываются несколько включений и рассматриваются отдельные кристаллиты в матрице. Неоднородность структуры, связанная не только с присутствием разных фаз, но и неоднородность внутренней структуры внутри одной фазы играют важную роль в таких исследованиях.

Особенности структуры металлокерамических композитов обуславливают интерес к описанию пластической деформации внутри матрицы, накопления повреждений и растрескивания в упрочняющей фазе и на границах раздела “матрица – включение”. В данной работе основное внимание обращено на распределение пластических деформаций в матрице.

Для моделирования пластических деформаций в моно- и поликристаллах кроме широко используемых определяющих соотношений, основанных на феноменологических моделях теории пластического течения и деформационной теории пластичности с критерием текучести Мизеса, в последние годы появились новые микромеханические модели пластичности кристаллов, основанные на континуальном описании скольжения в кристаллах [7–9]. Несмотря на большой успех в моделировании локализации деформации (благодаря так называемому “геометрическому” и “вершинному” разупрочнению), эти модели, к сожалению, не лишены недостатков. С одной стороны, в этих моделях предполагается однородная деформация зерна и теория не содержит масштабных параметров. С другой стороны, в них не принимается во внимание формирование дислокационных субструктур при умеренных и больших пластических деформациях. Наконец, эти модели довольно слож-

ны для вычислительных приложений и требуют большей мощности компьютеров для их использования.

В работе [8] проведено сравнение результатов расчетов по теории пластичности кристаллов и теории течения с изотропным степенным упрочнением для металлокерамических композитов. Отмечено, что отличие в макроскопическом поведении (σ – ϵ -диаграммы) довольно мало и растет с ростом удельной доли упрочняющей фазы. Сравнение картин распределения локальных деформации также показало их хорошее соответствие, хотя при применении моделей пластичности кристаллов локализация выражена более сильно.

Поэтому в данной работе применена теория течения с критерием текучести Мизеса. Упор сделан не на изучение конкретной мезоструктуры какого-либо материала, а на общие черты моделирования подобных материалов. Цель работы — оценить влияние следующих факторов: а) описание пластических свойств окружающей матрицы (изотропная однородная матрица и с учетом разных факторов Шмида для разных зерен); б) вид двумерного напряженного состояния (условия плоской деформации и плоского напряженного состояния); в) применение различных численных методов (моделирование квазистатического процесса методом конечных элементов и динамического процесса конечно-разностным методом).

2. Мезообъем материала для моделирования

Входные данные для расчетов, относящиеся к свойствам материала и его мезоструктуре, включают: 1) фотографию (файл с растровым изображением) мезообъема; 2) упругие изотропные модули для поликристаллического материала; 3) σ – ϵ -диаграмму для поликристаллического материала; 4) факторы Шмида для различных зерен в поликристаллическом агрегате.

Для моделирования был выбран мезообъем, представленный на рис. 1, мезоструктура которого соответ-

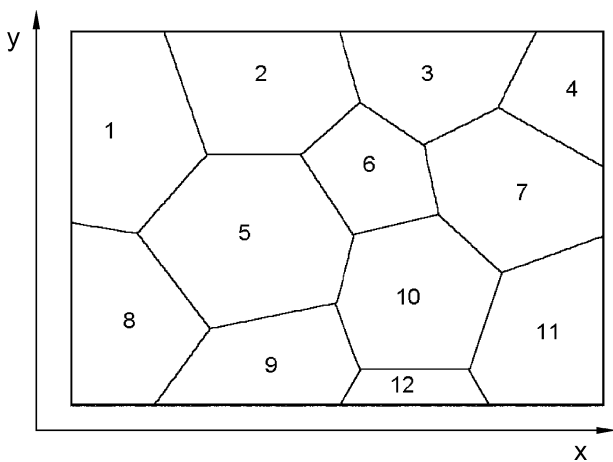


Рис. 1. Идеализированная мезоструктура металлокерамического композита

Таблица 1

Факторы Шмида для зерен мезообъема, представленного на рис. 1	
Номер зерна	Фактор Шмида
5; 9	0.5
1; 3	0.4726
2	0.4705
4	0.4593
11	0.4058
7; 8	0.4054
10	0.4029
12	0.2722

ствует структуре поликристаллического сплава Cu 5% Al, приведенного в работе [9]. Области с разными номерами на рис. 1 представляют собой зерна с разной ориентацией. Предполагалось, что зерно с номером 6 представляет собой упрочняющее керамическое включение с чисто упругим поведением. Размер области составляет 0.7×1 см².

Предполагается, что упругие свойства и σ – ϵ -диаграмма для поликристаллического материала матрицы известны. Для аппроксимации σ – ϵ -диаграммы использовалось уравнение вида $\sigma = \sigma_0 (\epsilon/\epsilon_0)^n$. Ориентация всех зерен в мезообъеме также полагается известной, факторы Шмида для соответствующих зерен приведены в таблице 1. Предполагается также, что керамическое включение претерпевает только упругие деформации и его упругие свойства известны.

Для описания пластического поведения отдельных зерен в поликристаллическом агрегате применялась теория течения с критерием текучести Мизеса и с изотропным упрочнением. При необходимости, для задания напряжения течения в отдельных зернах использовалась модель Шмида–Закса. В этом случае, критическое напряжение при одноосном нагружении для зерна i может быть вычислено по формуле $\sigma_{c,i} = \sigma_c / (m \cdot s_i)$, где $m = 2.24$ — фактор Закса (обратный фактор Шмида), осредненный по всем возможным ориентациям зерен в предположении, что только одна система скольжения с наиболее благоприятной ориентацией является активной в каждом зерне) для ГЦК-кристаллов; s_i — фактор Шмида для зерна i и σ_c — среднее напряжение течения для поликристаллического изотропного материала.

Поскольку предполагается исследовать поведение мезообъема внутри массивного образца, исследуемый объем помещался в “окружение” со свойствами однородного поликристаллического материала и размерами в два раза большими, чем изучаемый объем, в каждом направлении. Это позволяет при проведении расчетов уменьшить влияние свободных поверхностей на получаемое решение.

Рассмотренная модель подвергалась растяжению в направлении оси x до 2 % общей деформации.

3. Численные методы

3.1. Метод конечных элементов

Моделирование методом конечных элементов (МКЭ) проводилось с помощью программы LARSTRAN [10]. При моделировании использовалась регулярная расчетная сетка, состоящая из шестиузловых треугольных элементов для расчета плоского деформированного состояния, с использованием методики “мультифазных элементов” [11] для учета неоднородности материала. Конечно-элементная сетка для исследуемого мезообъема состояла из 1260 элементов. Результаты расчета представлялись в виде распределения эффективной эквивалентной пластической деформации $\varepsilon_{eq} = \frac{1}{1+\nu} \sqrt{\frac{2}{3} \varepsilon_{ij}^p \varepsilon_{ij}^p}$, где ε_{ij}^p — пластическая часть тензора деформации.

3.2. Конечно-разностный метод

Моделирование конечно-разностным методом (КРМ) осуществлялось с использованием программы, основанной на конечно-разностной схеме, описанной в работе [12]. Свойства материала приписывались ячейкам расчетной сетки, используя процедуру наложения регулярной квадратной сетки на растровое изображение мезоструктуры. Считалось, что каждая ячейка конечно-разностной сетки состоит из того материала, которому соответствует центральная точка ячейки. Для уменьшения влияния распространяющихся упругих волн и их взаимодействия на напряженно-деформированное состояние, использовалось медленное увеличение значений скоростей в расчетных узлах при задании нагрузки. Расчеты были проведены на двух сетках: крупной, состоящей из 3312 ячеек, и мелкой сетке, состоящей из 25594 ячеек.

Эффективная эквивалентная пластическая деформация для каждой ячейки вычислялась по формуле $\varepsilon_{eq} = \frac{1}{1+\nu} \int_0^t \sqrt{\frac{2}{3} \dot{\varepsilon}_{ij}^p \dot{\varepsilon}_{ij}^p} dt$, где $\dot{\varepsilon}_{ij}^p$ — пластическая часть тензора скорости деформации.

3.3. Общие черты

В расчетах ставились следующие граничные условия: на правой грани расчетной области в узлах расчетной сетки для квазистатического моделирования МКЭ задавались x -компоненты векторов перемещений, а для динамического моделирования КРМ — векторов скоростей; левая грань была зафиксирована относительно перемещений в направлении оси x , а верхняя и нижняя грани считались свободными от напряжений.

Касаясь внутренних граничных условий на границах зерен, следует отметить, что континуальный подход механики позволяет рассматривать поликристаллический агрегат как континуум с требованием равновесия векторов напряжений и непрерывности перемещений на границах зерен. Это, конечно, упрощенное описание, и оно не отражает реальное влияние границ зерен на развитие пластических деформаций в поликристаллах, особенно при повышенных температурах. Однако проблема влияния внутренних границ раздела (границ зерен) очень специфическая, сложная и должна быть рассмотрена отдельно.

Для настоящего анализа, распределения эффективных пластических деформаций были построены с помощью программы обработки результатов конечно-элементных расчетов PATRAN [13]. Использование одной программы для обработки результатов расчетов позволяет уменьшить различие в построенных картинах деформации, полученных разными программами.

4. Результаты и их обсуждение

4.1. Условия плоской деформации

Прежде всего, были проведены расчеты для изотропной однородной матрицы. В этом случае предполагалось, что все зерна имеют одни и те же упругие и пластические свойства. Распределения эффективных эквивалентных пластических деформаций как для расчетов МКЭ, так и КРМ представлены на рис. 2. Сравнение этих данных показывает, что согласие результатов КРМ для крупной сетки с расчетами МКЭ гораздо лучше по сравнению с результатами КРМ для мелкой сетки. Некоторые количественные отличия между ними можно объяснить различием использованных расчетных сеток (как по размерности, так и по геометрии элементов), и как следствие, разным описанием формы включения, а также очевидным различием в вычислительных методах. Качественные отличия в распределениях пластических деформаций для моделирования КРМ с мелкой сеткой, по сравнению как с моделированием КРМ на крупной сетке, так и с расчетами МКЭ, свидетельствуют о важности точности описания формы включения. Хотя его влияние существенно сказывается только вблизи границы раздела “включение – матрица”, оно может значительно изменить расположение областей с максимальными напряжениями и полос локализованной деформации, а это может привести к значительному изменению общего напряженно-деформированного состояния и его эволюции.

Следующие расчеты были проведены с учетом разных факторов Шмида для разных зерен в матрице. Учет пластической анизотропии (или, точнее, пластической неоднородности) пластичной матрицы приводит к перераспределению пластической деформации. Результаты расчетов, представленные на рис. 3, показывают, что

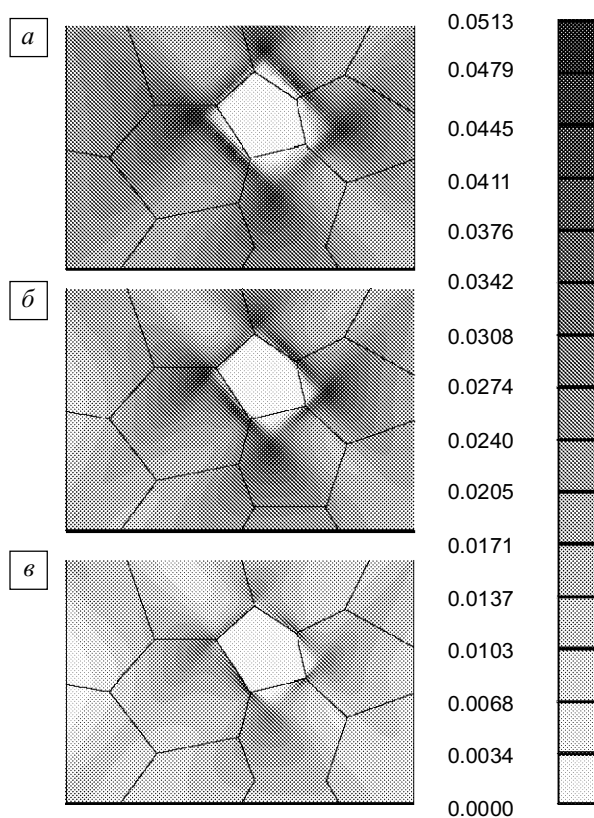


Рис. 2. Распределение эффективных эквивалентных пластических деформаций в случае изотропной матрицы и плоского деформированного состояния: моделирование методом конечных элементов (а); моделирование конечно-разностным методом на крупной сетке (б); моделирование конечно-разностным методом на мелкой сетке (в)

полосы сдвига отмечаются не только вблизи упрочняющей частицы, но также и внутри более мягких зерен, расположение полос при этом согласуется с направлением максимальных касательных напряжений. В то же время, ввиду того, что различие в свойствах между двумя фазами гораздо больше, чем между зёрнами, влияние включения является определяющим для всей картины деформации. Самое большое отличие наблюдается в области большого градиента (перепада) прочностных свойств. Именно в мягких зёрнах 9, 10, 11, окружающих самое прочное зерно 12 и отмечается образование дополнительных полос сдвига. Между остальными зёрнами различие факторов Шмида меньше и распределение деформаций не сильно отличается от варианта с однородной матрицей. Распределения, полученные моделированием МКЭ и КРМ на крупной сетке, снова похожи.

Распределение скоростей поворотов и сдвигов на рис. 4, полученное при моделировании КРМ, показывает, что экстремальные значения скоростей поворотов соответствуют большей локализации пластической деформации. Как отмечалось ранее в работе [14], анализ распределения скоростей поворотов позволяет выявить области локализации еще до того, как они проявляются

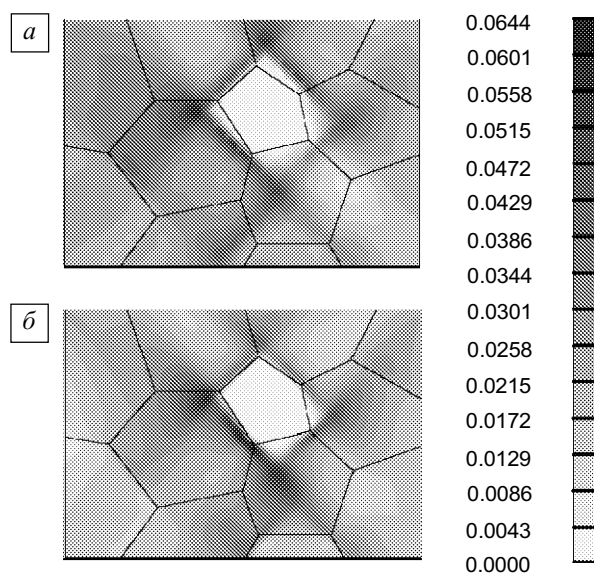


Рис. 3. Распределение эффективных эквивалентных пластических деформаций в случае различных факторов Шмида для разных зерен в матрице и плоского деформированного состояния: моделирование методом конечных элементов (а); моделирование конечно-разностным методом на крупной сетке (б)

в картинах пластической деформации. Наклон полос сдвига вправо соответствует положительным поворотам и наоборот.

4.2. Плоское напряженное состояние

Для плоского напряженного состояния было выполнено моделирование только конечно-разностным методом. Расчеты показали, что картины деформаций изменяются как для случая изотропной матрицы, так и в случае разных факторов Шмида для разных зерен в матрице. Результаты расчетов представлены на рис. 5. Видно, что локализация деформации имеет место в основном около угловых точек включения, расположенных вдоль оси нагружения. Для случая анизотропной матрицы в более мягком зерне, близко расположенном к левому углу упрочняющего включения, наблюдается большая локализация деформаций. Полосы локализованной деформации в области сильного градиента прочностных свойств и нижней угловой точки включения выражены гораздо слабее.

В случае плоского напряженного состояния возможно проанализировать изменение толщины образца, рассчитанной по формуле $h = h_0 \exp\left(\int_0^t \dot{\epsilon}_{zz} dt\right)$, где h_0 — начальная толщина образца. Это распределение в форме трехмерной поверхности показано на рис. 6. Ясно видно, что пластические деформации сконцентрированы в мягких зёрнах и достигают максимальных значений вблизи одной из угловых точек включения.

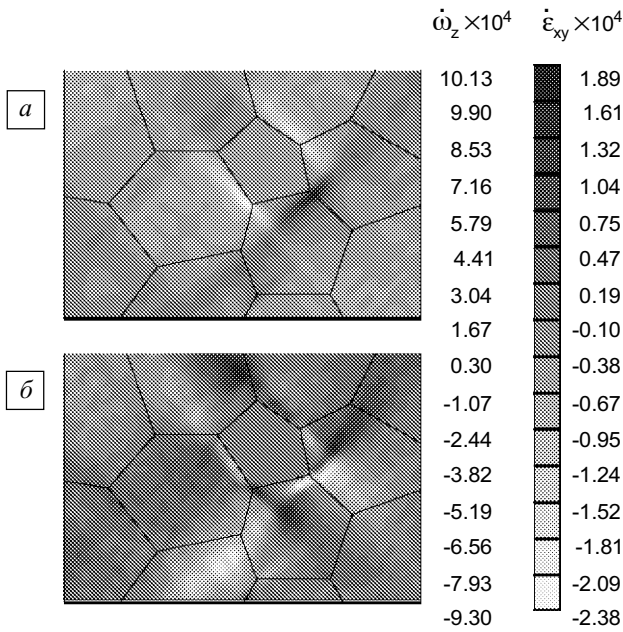


Рис. 4. Изолинии скоростей поворотов (а) и скоростей сдвигов (б) при моделировании конечно-разностным методом

5. Выводы

Проведен численный анализ распределений пластических деформаций в пластичной матрице металллокерамического композита, основанный на двух численных методах. Показано, что описание формы включений расчетной сеткой играет критическую роль в распределении пластических деформаций вблизи включения.

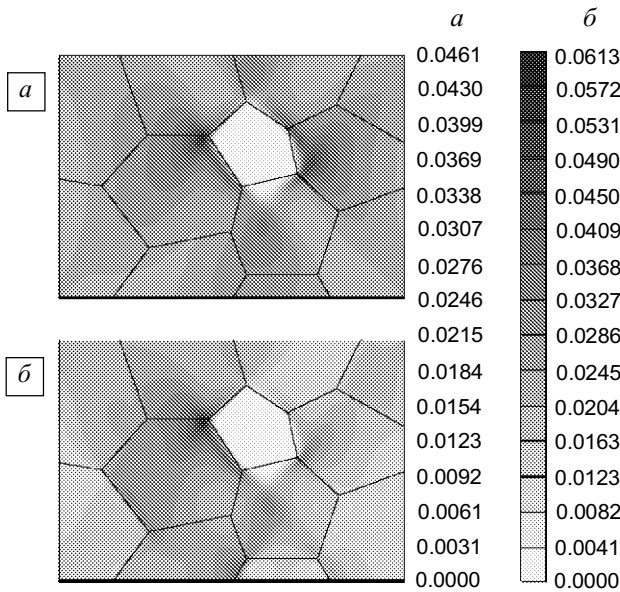


Рис. 5. Изолинии эффективной пластической деформации для плоского напряженного состояния в случае изотропной матрицы (а) и с учетом разных факторов Шмида для разных зерен в матрице (б)

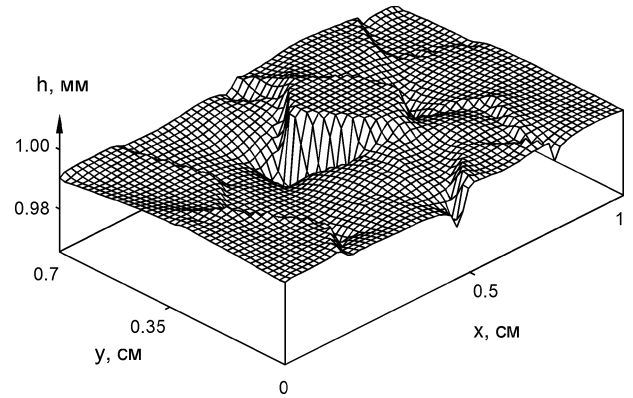


Рис. 6. Распределение толщины образца для плоского напряженного состояния и с учетом различных факторов Шмида для разных зерен в матрице

Для одинаковых (геометрически схожих) сеток моделирования метод конечных элементов и конечно-разностный метод дают похожие результаты. Учет поликристаллической структуры матрицы в простой форме различных факторов Шмида для разных зерен и изотропного упрочнения приводит к перераспределению пластических деформаций в полосы локализованной деформации в мягких зернах, соседствующих с наиболее прочным зерном. Анализ разных представлений выходных данных в виде скоростей поворотов и сдвигов, а также толщины образца для случая плоской деформации позволяет выявить тонкие особенности развития напряженно-деформированного состояния.

Благодарности

Первый автор выражает благодарность Немецкой службе академических обменов (DAAD) за финансовую поддержку его пребывания и проведения исследований в течение 3 месяцев в г. Штутгарте, Германия.

Литература

1. Soppa E., Schmauder S., Fischer G. Numerical and experimental investigations of the influence of particle alignment on shear band formation in Al/SiC // Proc. of the 19th Risø Int. Symp. on Materials Science "Modelling of structure and mechanics of materials from microscale to product" / Ed. by J.V. Carstensen, T. Leffers, T. Lorentzen, O.B. Pedersen, B.F. Sørensen, G. Winther. – Risø National Laboratory, Roskilde, Denmark, 1998. – P. 499–504.
2. Fischer G., Soppa E., Schmauder S., Liu Y.-L. Modelling of strain localization in real microstructural areas of the particle reinforced metal-matrix composite Al6061-10%Al₂O₃ // Proc. of the 19th Risø Int. Symp. on Materials Science "Modelling of structure and mechanics of materials from microscale to product" / Ed. by J.V. Carstensen, T. Leffers, T. Lorentzen, O.B. Pedersen, B.F. Sørensen, G. Winther. – Risø National Laboratory, Roskilde, Denmark, 1998. – P. 499–504.
3. Xu D., Schmauder S., Soppa E. Influence of geometry factors on the mechanical behavior of particle- and fiber-reinforced composites // Computational Materials Science. – 1999. – V. 15. – P. 295–301.

4. *Fundamentals of metal-matrix composites* / Ed. by Subra Suresh. – Boston: Butterworth-Heinemann, 1993. – 342 p.
5. *Mechanics of materials with intrinsic length scale: physics, experiments, modelling and applications* // Proc. of the 2nd European conference EUROMECH–MECAMAT'97, 23–26 February 1998, Magdeburg, Germany / Ed. by A. Bertram, S. Forest, F. Sidoroff. – Les Ulis: Editions de Physique, 1998. – 420 p.
6. *Computer simulation in materials science: nano/meso/macrosopic space & time scales* / Ed. by O. Helmut. – Kirchner-Dordrecht: Kluwer Acad. Publ., 1996. – 603 p.
7. *Asaro R.J. Micromechanics of crystals and polycrystals* // Advances in Appl. Mech. / Ed. by J.W. Hutchinson. – New York: Academic Press. – 1983. – V. 23. – P. 1–115.
8. *McHugh P.E., Asaro R.J., Shih C.F. Crystal plasticity models* // Fundamentals of Metal Matrix Composites / Ed. by S. Suresh. – Boston: Butherworth-Heinman, 1993. – P. 139–157.
9. *Harder J. Simulation lokaler Fließvorgänge in Polykristallen* // Braunschweiger Schriften zur Mechanik. – Mechanik-Zentrum, Technische Universität Braunschweig. – 1997. – V. 28. – 181 p.
10. *LARSTRAN User's Manual*. – Leinfelden-Echterdingen: LASSO Ingenieuresellschaft, 1994.
11. *Steinkopff Th., Sautter M. Simulating the elasto-plastic behavior of multiphase materials by advanced finite element technique* // Computational Materials Science. – 1995. – V. 4. – P. 10–14.
12. *Уилкинс М.Л. Расчет упруго-пластических течений* // Вычислительные методы в гидродинамике / Под ред. Б.Олдера, С. Фернбаха, М. Ротенберга. – М.: Мир, 1967. – С. 212–263.
13. *PATRAN Exercise Workbook*. – Costa Mesa, PDA Engineering, Software Products Division, 1994.
14. *Makarov P.V., Smolin I.Y., Prokopinsky I.P. Localized plastic strain in polycrystalline materials with hole and notches* // Theoretical and Applied Fracture Mechanics. – 1998. – V. 29. – P. 11–20.