ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

**МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
«Перспективные материалы с иерархической структурой
для новых технологий и надежных конструкций»**

**X МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
«Химия нефти и газа»**

Томск

Издательский Дом ТГУ

2018

DOI: 10.17223/9785946217408/22

**ОПИСАНИЕ ТВЕРДОТЕЛЬНЫХ ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В СТРУКТУРЕ
ПРЯМОЙ МНОГОУРОВНЕВОЙ МОДЕЛИ ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО
МАТЕРИАЛА**

¹Макаревич Е.С., ¹Кондратьев Н.С., ¹Трусов П.В.

¹*Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь, Россия*

Технологии термомеханической обработки металлов и сплавов в настоящее время повсеместно применяются в промышленном производстве для формирования требуемой структуры материала на всех масштабных уровнях в ходе разработки новых материалов и модификации существующих. При этом в современном материаловедении актуальной задачей является разработка новых физических и математических моделей материалов, учитывающих изменение структуры материала на различных масштабных уровнях для качественного и количественного описания изменения свойств материала в зависимости от приложенных термомеханических воздействий в процессе обработки. Разработка и применение для этих целей многоуровневых конститутивных моделей, основанных на использовании физических теорий пластичности поликристаллов, позволяет предложить гибкий инструмент моделирования, содержащий в своей структуре описание именно тех мод деформирования и ротации материала, которые существуют в реальном материале, причем на том масштабном уровне, на котором они наблюдаются. Таким образом, идеология многоуровневого моделирования позволяет приблизить разрабатываемые модели материалов к их реальным аналогам и получить уникальный инструмент, который в будущем позволит использовать инструмент моделирования для конструирования функциональных материалов с необходимой микроструктурой и требуемыми физико-механическими свойствами.

С точки зрения описания структуры материала, получаемой в результате термомеханической обработки, важнейшую роль играет разработка подмодели для описания твердотельных фазовых превращений. В рамках применяемого многоуровневого подхода в модельном материале вводится три структурно-масштабных уровня: макроуровень (уровень представительного макрообъема, с точки зрения решения краевой задачи для некоторой конструкции – макроточка), мезоуровень I и мезоуровень II. Под элементом мезоуровня I понимается некоторая подобласть зерна, состояние которой полагается однородным по всем параметрам в каждый момент в процессе термомеханического воздействия и в рамках которой кристаллическую решетку материала можно считать примерно совершенной. Ориентация осей кристаллографической системы координат элемента, связанной с решеткой, в текущей конфигурации считается известной. Под элементом мезоуровня II понимается некоторый объем материала на том же масштабном уровне, в рамках которого описываются более «тонкие» дислокационные механизмы деформирования материала. В результате термических и механических воздействий (передаваемых с верхнего масштабного уровня) в элементе мезоуровня в случае выполнения термодинамического критерия может реализоваться фазовый переход. Под твердотельным фазовым превращением в поликристаллическом материале в работе понимается полиморфное превращение, приводящее к изменению физико-механических свойств некоторой области материала на мезоуровне в результате трансформации кристаллического строения при приложении внешних воздействий (нагрузки, температуры и т.д.). Под фазой в работе понимается область зерна, характеризующаяся в фиксированный момент процесса термомеханического нагружения конкретным типом кристаллической решетки, химическим составом, типом твердых растворов и т.д. С позиций математического моделирования и МДТГ под фазой в работе понимается некоторая подобласть материала, поведение которой при деформировании описывается определяющими соотношениями фиксированного типа с заданным (определенным из решения вспомогательных подзадач) набором свойств, определяющихся параметрами и текущим значением внутренних переменных.

Секция 1. Основные принципы и методология физической мезомеханики материалов с иерархической структурой

В предлагаемой работе рассматривается конститутивная модель представительного макрообъема материала. Под представительным объемом материала на макроуровне понимается поликристаллический агрегат, состоящий из большого числа кристаллитов (зерен, субзерен), для анализа поведения которого ставится и решается краевая задача. При решении краевой задачи на уровне представительного макрообъема рассматривается расчетная область, состоящая из нескольких сотен зерен. Реализуется декомпозиция общей задачи по физическим процессам: рассматриваются связанные (с использованием пошаговой процедуры) подзадачи определения напряженно-деформированного состояния, теплопроводности и фазового превращения. Для численного решения задачи применяется процедура метода конечных элементов. В результате решения задачи на макроуровне определяется воздействие в каждой точке пространства, которое затем передается на более глубокий масштабный уровень.

В начальный момент процесса все кристаллиты (элементы мезоуровня I) в рамках каждого из зерен, считаются однофазными. В результате действия приложенных нагрузок и температурного воздействия каждый элемент мезоуровня I может перейти в новую фазу, если в фиксированный момент процесса для него выполняется критерий фазового превращения, в результате чего зерна могут стать многофазными. Принимается гипотеза о том, что при фазовом превращении дефектная структура элемента исходной фазы наследуется в элементе новой фазы. Каждый элемент мезоуровня I характеризуется ориентацией осей жесткой подвижной системы координат (ПСК), связанной с кристаллической решеткой элемента, но в общем случае с ней не совпадающей (в силу того, что кристаллическая решетка элемента может испытывать упругие искажения в процессе неупругого деформирования). В результате решения задачи на мезоуровне I ориентация осей ПСК элемента может измениться, например, в результате реализовавшегося фазового превращения. При этом изменяется ориентационный тензор элемента мезоуровня I.

На мезоуровне I реализуются следующие моды деформирования и ротации материала: неупругое деформирование сдвигами по системам скольжения в кристаллите, деформация кристаллита за счет фазового превращения, упругие искажения решетки кристаллита, учет поворотов кристаллитов и изменения ориентации решетки при фазовом превращении. В результате решения задачи на мезоуровне I определяются действующие касательные напряжения по системам скольжения в кристаллите. Они, в свою очередь, вместе с термическим воздействием передаются на мезоуровень II для определения скоростей движения дислокаций и скоростей сдвигов по системам скольжения в кристаллите (из уравнения Орована). На мезоуровне II определяются также критические напряжения сдвига по системам скольжения как функции плотностей дислокаций, которые передаются обратно на мезоуровень I. В качестве отклика с мезоуровня I на макроуровень передается действующее напряжение в элементе, мощность внутренних тепловых источников (за счет скрытой теплоты фазовых превращений и неупругого деформирования) и ориентационный тензор элемента мезоуровня, характеризующий текущую ориентацию ПСК элемента по отношению к фиксированной лабораторной системе координат.

Задача определения реакции материала на приложенное термомеханическое воздействие в рамках предложенной прямой многоуровневой модели является существенно нелинейной. Для ее решения используется пошаговая итерационная процедура (по времени). На начало шага на входе итерационной процедуры передается термомеханическое воздействие на элемент мезоуровня I с верхнего масштабного уровня как результат решения краевой задачи на макроуровне, состояние материала на начало шага известно либо из начальных условий, либо из решения задачи на предыдущем временном шаге. В результате решения задачи на мезоуровне I и процедуры интегрирования определяется состояние элемента мезоуровня I на конец шага.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ (базовая часть государственного задания ПНИПУ, проект №9.7434.2017/БЧ) и РФФИ (в рамках научного проекта № 16-31-60002 мол_a_дк).