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: 10.17223/9785946217408/24

**МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕУПРУГОГО ДЕФОРМИРОВАНИЯ С УЧЕТОМ ПРОЦЕССА
РЕКРИСТАЛЛИЗАЦИИ И ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ**

Кондратьев Н.С., Макаревич Е.С.

Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь, Россия

На данный момент одной из наиболее важных и актуальных задач механики деформируемого твердого тела является проблема описания эволюции дефектной структуры поликристаллических материалов, которая определяет макросвойства материала [1]. При термомеханической обработке мезо- и микроструктура поликристаллов претерпевает существенные изменения, она определяет физико-механические свойства материалов и рабочие характеристики готовых изделий [2]. Моделирование эволюции внутренней структуры является эффективным способом разработки новых подходов, методов, технологий получения материалов и изделий с повышенными эксплуатационными характеристиками. Для физически корректного моделирования этой структуры эффективным инструментом являются многоуровневые модели, основанные на физических теориях упруговязкопластичности [3]. Широко распространенным способом изменения зеренной и дефектной (в первую очередь дислокационной) структуры является термомеханическая обработка, в результате которых реализуются процессы твердотельных фазовых переходов и рекристаллизации. В работе рассматривается модификация двухуровневой физической модели неупругого деформирования, позволяющая описывать процесс статической рекристаллизации [4]. В качестве основного принят механизм рекристаллизации, основанный на движении участков большеугловых границ, исходно существующих в поликристалле. Предложена подмодель для описания эволюции геометрии зеренной структуры поликристалла при механических и термических воздействиях, рассматривается подход к определению границ новых рекристаллизованных зерен на основе энергетического критерия минимизации межзеренной энергии. В рамках разрабатываемой модели предложен способ моделирования зародышей рекристаллизации – субзерен. Предложен способ выделения фасеток границ новых (рекристаллизованных) зерен, основанный на решении задачи минимизации межзеренной энергии фасеток новой границы. В случае рассматриваемого механизма рекристаллизации можно считать, что одна площадка рекристаллизованного зерна и соответствующая ей нормаль фасетки границы определена и совпадает с исходной большеугловой границей зародыша рекристаллизации (субзерна), остальные определяются при решении задачи минимизации энергии фасеток межзеренной границы, способ расчета которой предложен в [5]. Для решения этой задачи за основу был выбран метод Нелдера-Мида (метод деформируемого многогранника). В данном методе не используется градиент, в силу чего он может применяться к негладким функциям. Проведено тестирование программы численной реализации данного алгоритма на гладких выпуклых функциях двух переменных. Используемый подход выделения фасеток границ рекристаллизованных зерен является перспективным с точки зрения учета и рассмотрения специальных границ с пониженной энергией, количество которых растет в процессе рекристаллизации. Недостатком данного подхода являются значительные вычислительные затраты, для устранения которого предлагается подход, основанный на аппроксимации целевой функции (критерия оптимальности) гладкими функциями. Разработана структура многоуровневой конститутивной модели материала, включающая в себя физическую упруговязкопластическую модель для описания поведения представительного объема мезоуровня с учетом твердотельных фазовых превращений. На мезоуровне предложены кинематические и определяющие соотношения в скоростной форме, включающие в явном виде градиент трансформационной деформации, определяемый в зависимости от типа реализующегося фазового превращения. Построение критерия фазового перехода для представительного объема мезоуровня базируется на принципах классической термодинамики необратимых процессов. Разработан программный комплекс, основанный на

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

методе конечных элементов, реализующий разрабатываемые многоуровневые физические модели материала. Программный комплекс позволяет определять напряженно-деформированное и температурное состояние произвольной конструкции в широком диапазоне термомеханических воздействий, а также исследовать состояние внутренней структуры (включая фазовый состав) материала в каждой точке исследуемой области. С использованием разработанного программного комплекса проведены тестовые расчеты, моделирующие твердотельные фазовые переходы и рекристаллизацию в поликристаллах.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-31-60002 мол_а_дк.

Литература

1. Трусов П.В., Швейкин А.И., Нечаева Е.С., Волегов П.С. Многоуровневые модели неупругого деформирования материалов и их применение для описания эволюции внутренней структуры // Физическая мезомеханика. – 2012. – Т. 15. – №. 1. – С. 33-56.
2. Трусов П.В., Швейкин А.И. Многоуровневые физические модели моно- и поликристаллов. Статистические модели // Физическая мезомеханика. – 2011. – Т. 14. – №. 4. – С. 17-28.
3. Трусов П.В., Волегов П.С., Кондратьев Н.С. Физические теории пластичности – Пермь: Изд-во ПНИПУ, 2013. – 244 с.
4. Трусов П.В., Кондратьев Н.С. Двухуровневая упруговязкопластическая модель: применение к анализу эволюции зеренной структуры при статической рекристаллизации // Физическая мезомеханика. – 2018 – Т. 21, № 2. – С. 21-32.
5. Kondratev N.S., Trusov P.V. Calculation of the intergranular energy in two-level physical models for describing thermomechanical processing of polycrystals with account for discontinuous dynamic recrystallization // Nanomechanics Science and Technology: An International Journal. – 2016. – Т. 7. – №. 2.