

Компьютерное конструирование высокопрочных градиентных материалов, работающих при динамических нагрузках*

Р. А. Кректулева

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия

Рассмотрена методика компьютерного конструирования материалов с повышенными прочностными свойствами на основе применения многокомпонентных систем с градиентным распределением концентрации компонент. Показано, что в соответствии с синергетическим представлением об ударно-деформируемом материале как об открытой системе с помощью градиентных материалов удастся осуществить контроль за поведением нагруженного материала в неравновесном состоянии. Использование градиентных материалов при интенсивных динамических нагрузках (удар, взрыв) позволяет повысить устойчивость системы за счет снижения общего прироста энтропии, что согласуется с теоремой Пригожина–Климонтовича.

Ключевые слова: компьютерное конструирование, прочность, состав, градиентный материал, изоэнтропическое сжатие, волновой процесс, изоэнтропическая разгрузка.

Введение. Градиентными материалами (ГМ) принято называть материалы с плавным изменением свойств в каком-либо направлении. Впервые такие материалы (пленки толщиной в несколько долей миллиметра) получил в 1944 г. академик С. А. Векшинский путем ионного напыления различных элементов в вакууме [1]. С помощью одной такой пленки можно исследовать большой набор сплавов с дискретным изменением состава. В дальнейшем, начиная с 1959 г., сплавы переменного состава начали получать по технологиям сварки и наплавки, что позволило использовать их в качестве упрочняющих покрытий и соединительных прослоек между разнородными материалами [2]. Новые возможности в создании градиентных материалов открылись с развитием технологий спекания порошков, в частности, СВЧ-технологий (самораспространяющийся высокотемпературный синтез). Однако, чтобы создавать материалы с некоторыми наперед заданными свойствами, нужны определенные математические модели и отправные теоретические идеи. Их обсуждению и посвящена настоящая работа.

Общая схема компьютерного конструирования градиентных материалов. Несмотря на то что на практике градиентные материалы используются более полувека, теоретическому решению задач их создания и исследования до сих пор уделяется очень мало внимания. Не останавливаясь на трудностях, возникающих при этом, перейдем непосредственно к рассмотрению возможного решения поставленной проблемы.

Выделим четыре основных блока математических моделей: состав–технология–структура–свойство, которые обязательно должны присутствовать в схеме компьютерного конструирования градиентных материалов. Модели-

* Доклад на IV Международном симпозиуме “Прочность и разрушение материалов и элементов конструкций при импульсном нагружении” (IMPULSE-2001).

рование каждого блока можно рассматривать как в общей связи, так и отдельно. На рис. 1 представлена общая схема компьютерного конструирования градиентных материалов. Кратко остановимся на ее описании. Вначале выбирается рецептурный состав следующим образом. Строится функция цели Z :

$$Z = \beta_1 \alpha_1 + \beta_2 \alpha_2 + \dots + \beta_N \alpha_N. \quad (1)$$

Здесь под функцией цели понимается какое-то предъявляемое к материалу требование. Это может быть минимальная цена изделия, определенное время эксплуатации при заданных нагрузках, вес конструкции и т.д. Необходимо найти значения β_N , которые обеспечивают максимум или минимум линейной целевой функции Z при условии, что выполнены такие линейные ограничения:

$$\begin{aligned} a_1 &= \alpha_1 a_{11} + \alpha_1 a_{12} + \dots + \alpha_1 a_{1N}; \\ &\dots \dots \dots \dots \dots \end{aligned} \quad (2)$$

$$a_m = \alpha_m a_{m1} + \alpha_m a_{m2} + \dots + \alpha_m a_{mN};$$

$$1 = \alpha_1 + \alpha_2 + \dots + \alpha_N \quad (3)$$

и условие неотрицательности

$$\alpha_i \geq 0, \quad (4)$$

где α_i – весовая доля i -го компонента в многокомпонентном материале (для градиентного материала α_i является функцией координат); a_i – набор некоторых заданных свойств; N – общее количество компонент.



Рис. 1. Общая схема компьютерного конструирования градиентных материалов.

В работах [3, 4] изложена методика определения значений a_i и показано, что в соотношения (2), как правило, входят не конкретные свойства материалов (например, плотность или модуль упругости), а некоторые их функции. При этом для материалов с невзаимодействующими фазами системе (1)–(4) удастся разрешить в терминах конкретных свойств материала с помощью методов линейного программирования [3–5], для ГМ со взаимодействующими фазами в общем случае решения нет. Однако в отдельных случаях [5] удастся найти решение методами нелинейного программирования.

После того как состав материала в первом приближении (с учетом функции цели) определен, переходят к выбору технологии, с помощью которой этот материал можно получить на практике. Подробное описание математических моделей ряда технологических процессов приведено, например, в работах [6–9]. Отметим, что от способа обработки, т.е. от технологических режимов, в первую очередь будет зависеть внутренняя структура материала (размер зерен и включений, микропористость), величина зоны термического влияния, вид функции $\alpha_i(x, y, z)$ – концентрации i -й компоненты как функции пространственных переменных (x, y, z) . В условиях статического и квазистатического нагружения исходная внутренняя мезоструктура может существенно повлиять на развитие деформационных процессов в материале [10]. Анализ многочисленных экспериментальных данных при импульсном ударном нагружении показал, что под действием ударной волны первоначальная структура материала разрушается и вместо нее образуется другая структура, которая зависит от амплитуды ударного импульса и его длительности [11]. На рис. 2 приведен пример расчета ударных адиабат медно-вольфрамовых элконитов разного состава по методике невзаимодействующих фаз [3, 4] в сравнении с экспериментом [12]. На рис. 3 и 4 представлены ударные адиабаты, рассчитанные по методике кластерных компонентов [5], ряда сплавов и керамики со взаимодействующими фазами в сравнении с экспериментом [12, 13]. Все расчеты выполнены без учета внутренней структуры материалов, тем не менее наблюдается вполне удовлетворительное совпадение расчетных и экспериментальных данных. Подобные сравнения проведены в широком интервале изменения давления для более чем 50 материалов, имеющих различную физическую природу: сплавы, металлокерамика, металлопластики, водонасыщенный песок и др. Во всех случаях имеет место согласование расчетных данных с экспериментальными в пределах ошибки опыта 2...15%. Это позволяет в условиях динамического нагружения пренебречь внутренней структурой в схеме компьютерного конструирования ГМ и сразу перейти к формулировке математических моделей последнего блока – напряженно-деформированного состояния и разрушения.

Основным результатом на первом этапе вычислений по рассматриваемой схеме должен быть ответ на вопрос, разрушится или нет образец ГМ в заданных условиях нагружения. Если после снятия нагрузки материал сохранил свою целостность, то расчеты прекращаются. На печать выдаются все паспортные характеристики ГМ: состав, концентрационная неоднородность по объему, способ получения (компактирование, наплавка и т.д.),

технологические режимы, дополнительная информация (например, предварительная стоимость материала). Если же сконструированный материал не удовлетворяет предъявленным требованиям, то расчет повторяется, причем есть два пути. Первый путь заключается в последовательном выборе материалов, технологий и технологических режимов в автоматическом поиске нужного варианта. Реализация такого подхода возможна только на суперкомпьютере. Второй путь состоит в тщательном анализе информации о физических процессах, получаемой на выходе от всех четырех расчетных блоков. По результатам анализа принимается некоторое осознанное решение о направлении дальнейшего поиска. Такой подход позволяет за небольшое количество расчетных циклов (иногда два-три) сконструировать материал с заданными свойствами. При этом все расчеты можно осуществить на обычном компьютере типа Pentium-III.

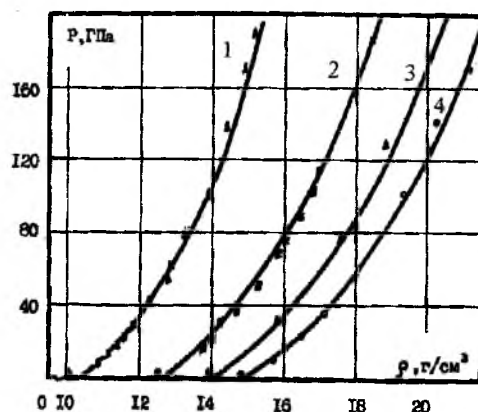


Рис. 2. Расчетная (линии) и экспериментальная (точки) зависимость давления P от плотности ρ медно-вольфрамовых элконитов переменного состава: 1 – 74,5/25,5%; 2 – 45/55%; 3 – 32/68; 4 – 24/76%.

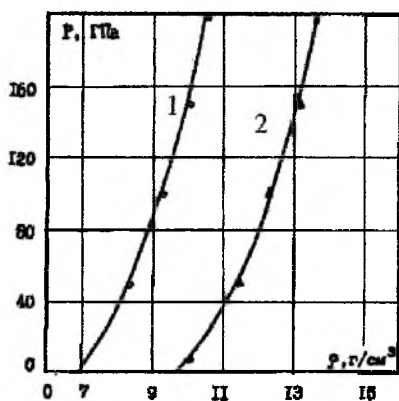


Рис. 3

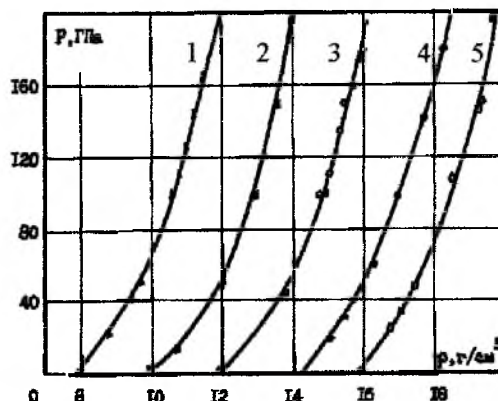


Рис. 4

Рис. 3. Расчетные (линии) и экспериментальные (точки) ударные адиабаты железосилициевой керамики двух составов: 1 – 80,2/19,8%; 2 – 96/4%. (Здесь и на рис. 4 каждая последующая кривая сдвинута на одно деление по оси абсцисс.)

Рис. 4. Ударные адиабаты железа (1) и железоникелевых инварных сплавов разного состава (2–4) и никеля (5): 2 – 32/68%; 3 – 74/26%; 4 – 60/40%.

Особенности поведения градиентных материалов при динамических нагрузках. Поскольку свойства ГМ изменяются от точки к точке, то возникающие при динамических нагрузках волны напряжений и деформаций будут трансформироваться в неоднородной среде по некоторым правилам, знание которых позволит эффективно управлять волновыми потоками энергии в нагруженном материале. Динамика распространения волн в нагруженной упругопластической среде переменного состава описывается системой уравнений [9, 14]

неразрывности

$$\frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dt} + \frac{\partial v_i}{\partial z_i} = 0, \quad (5)$$

движения

$$\rho \frac{dv_i}{dt} = \frac{\partial S_{ij}}{\partial z_j} - \frac{\partial P}{\partial z_i} \quad (6)$$

и энергии

$$\rho \frac{dE}{dt} = S_{ij} \varepsilon_{ij} + \frac{P}{\rho} \frac{d\rho}{dt}, \quad (7)$$

которые замыкаются соотношениями Прандтля–Рейса при условии текучести Мизеса:

$$\begin{cases} S_{ij} = \sigma_{ij} + \delta_{ij} P; \\ 2\mu_s \left(e_{ij} - \frac{1}{3} e_{kk} \delta_{ij} \right) = \frac{DS_{ij}}{Dt} + \lambda S_{ij}; \\ S_{ij} S_{ij} = \frac{2}{3} \sigma_s^2, \end{cases} \quad (8)$$

где z_i – координаты; t – время; ρ – текущая плотность; v_i – компоненты вектора скорости; S_{ij} – компоненты девиатора напряжений; P – давление; E – удельная внутренняя энергия; ε_{ij} – компоненты девиатора скоростей деформаций; σ_{ij} – компоненты тензора напряжений; e_{ij} – компоненты тензора скоростей деформаций; D/Dt – производная Яуманна; μ_s – модуль сдвига; σ_s – предел текучести; λ – малый параметр; δ_{ij} – символ Кронекера.

Влияние пластических деформаций, давления и температуры на прочностные характеристики матрицы учитывается следующим образом:

$$\begin{cases} \sigma_s = [\sigma_{s0} (1 + \beta_1 \varepsilon^P)^{n_1}] [1 + b P_s x^{1/3} - h(T - 300)]; \\ \mu_s = \mu_{s0} [1 + b P_s x^{1/3} - h(T - 300)]; \\ \varepsilon^P = \int d\varepsilon^P, \quad d\varepsilon^P = \sqrt{2/3 d\varepsilon_{ij}^P d\varepsilon_{ij}^P}, \end{cases} \quad (9)$$

где ε^P – эквивалентная пластическая деформация; ε_{ij}^P – компоненты тензора пластических деформаций; x – относительный объем (сжимаемость); σ_{s0} ,

μ_{s0} – значения предела текучести и модуля сдвига при нормальных условиях; β_1, n_1, b, h – постоянные материала. На приведенную систему накладываются ограничения:

$$\begin{cases} \sigma_{s0}(1 + \beta_1 \varepsilon^p)^{n_1} \leq \sigma_{s\max}; \\ \sigma_s = 0, \text{ если } T > T_m; \\ T = \frac{1}{C_V} \left(\frac{E}{\rho_0} - \varepsilon_0 \right); \\ T_m = T_{m0} x^{2/3} \exp[2\gamma_0(1-x)], \end{cases} \quad (10)$$

где T_{m0} – температура плавления при нормальных условиях; T_m – температура плавления при нагрузке.

Отсутствие химических превращений позволяет рассчитать начальный удельный объем сплава в заданной точке по модели невзаимодействующих фаз:

$$V_0 = \sum_{n=1}^N \alpha_n(z_i) V_{0n}, \quad \sum_{n=1}^N \alpha_n(z_i) = 1, \quad (11)$$

где $\alpha_n(z_i)$ – весовая доля компоненты (является заданной функцией координаты); V_{0n} – удельные объемы компонент при начальных условиях. Для такого случая уравнение состояния ГМ может быть представлено в виде

$$P_s = mAx^{-(m+1)} - \frac{B}{3}x^{-4/3} + \left(\frac{1}{2x} + \gamma_0 - \frac{1}{2} \right) (E\rho_0 - Ax^{-m} + Bx^{-1/3}), \quad (12)$$

где

$$\begin{cases} A = \gamma_0 \rho_0 E_0 / m(x_1^{m-1/3} - 1); \\ B = 3\gamma_0 \rho_0 E_0 / m(1 - x_1^{-(m-1/3)}); \\ x = \rho_0 / \rho, \quad x_1 = \rho_1 / \rho, \quad \gamma_0 = K_s \beta / C_V \rho_0. \end{cases} \quad (13)$$

Параметры многокомпонентного материала определяются следующим образом:

$$\begin{cases} \frac{1}{\rho} = \sum_{n=1}^N \alpha_n / \rho_{0n}; & \frac{1}{K_s} = \rho_0 \sum_{n=1}^N \alpha_n / \rho_{0n} K_{sn}; & C_V = \sum_{n=1}^N \alpha_n C_{Vn}; \\ \frac{1}{\rho_1} = \sum_{n=1}^N \alpha_n / \rho_{1n}; & \beta = \rho_0 \sum_{n=1}^N \alpha_n \beta_n / \rho_{0n}; & m = \sum_{n=1}^N \alpha_n m_n; \\ E_0 = \sum_{n=1}^N \alpha_n E_{0n}, \end{cases} \quad (14)$$

где K_s – изотермический модуль сжатия; β – коэффициент теплового расширения; C_V – теплоемкость при постоянном объеме; ρ_0 – начальная плотность; ρ_1 – плотность при $T = 0$; m – параметр межатомного взаимодействия; E_0 – начальная удельная энергия тепловых колебаний.

Аналогично определяются прочностные параметры многокомпонентного материала:

$$\begin{cases} \frac{1}{\mu_s} = \rho_0 \sum_{n=1}^N \alpha_n / \rho_{0n} \mu_{sn}; & \sigma_s = \sum_{n=1}^N \alpha_n \sigma_{sn}; & b = \sum_{n=1}^N \alpha_n b_{1n}; \\ h = \sum_{n=1}^N \alpha_n h_n; & \sigma_{smax} = \sum_{n=1}^N \alpha_n \sigma_{smaxn}; & T_{m0} = \sum_{n=1}^N \alpha_n T_{m0n}. \end{cases} \quad (15)$$

Методика численного решения системы уравнений (5)–(15) изложена в [9, 14]. Приведенная постановка задачи наиболее эффективна для исследования трансформации ударно-волновых профилей деформации, напряжения, энергии и температуры. В данной модели температура – наиболее чувствительный параметр, по которому удобно следить за всеми превращениями приложенного к материалу импульса энергии. Получая из численного решения температурные кривые и сравнивая с известными термодинамическими зависимостями, можно установить тип волны. Использование термодинамических критериев позволяет до предела упростить классификацию типов волн. Из термодинамики известно, что при ударных нагрузках в силу их кратковременности деформационные процессы – адиабатические. При этом существуют две возможности течения процесса: скачкообразное изменение параметров процесса, в том числе и энтропии (ударная адиабата Ренкина–Гюгонно – УА), и плавное их изменение при неизменной энтропии (адиабата Пуассона – АП). Численные расчеты показали, что в отличие от однородных материалов, в которых есть только два типа волн: ударные волны (УВ) сжатия, распространяющиеся от места приложения нагрузки, и изоэнтропические волны разгрузки, идущие со свободных поверхностей, в ГМ образуется и распространяется более сложная система волн [15]. Внутри ГМ обнаружены волны изоэнтропического сжатия (ВИЭС) и волны изоэнтропической разгрузки (ВИЭР), образующиеся вследствие расщепления первичной ударной волны, распространяющейся от места приложения нагрузки. В таблице приведена классификация объемных волн, образующихся при ударе однородного ударника по ГМ, состоящему из двух невзаимодействующих фаз с различными плотностями и объемными модулями изотермического сжатия.

Результаты компьютерных экспериментов по созданию упрочняющих градиентных покрытий. Как известно, “живые” природные объекты являются открытыми системами. Они функционируют с минимальным расходом энергии, а точнее, с минимумом энтропии, что обеспечивает им высокую вероятность существования и выполнения заданных природой функций. Проведем аналогию между ГМ и “живыми” системами.

Классификация объемных волн в ГМ при ударе

Модуль изотермического сжатия K_T	$K_{T>0}$	$K_{T<0}$
$K_{T_{УА}} < K_{T_{АЛ}}$	Прямая УВ с увеличивающимся импульсом давления Обратная ВИЭС, отраженная от ГМ Прямая ВИЭР, отраженная от ударника	Прямая УВ с падающим импульсом давления Обратная ВИЭР, отраженная от ГМ Прямая ВИЭР, отраженная от ударника
$K_{T_{УА}} = K_{T_{АЛ}}$	Прямая УВ с увеличивающимся импульсом давления Обратная ВИЭС, отраженная от ГМ	Прямая УВ с падающим импульсом давления Обратная ВИЭР, отраженная от ГМ
$K_{T_{УА}} > K_{T_{АЛ}}$	Прямая УВ с увеличивающимся импульсом давления Обратная ВИЭС, отраженная от ГМ Прямая ВИЭС, отраженная от ударника	Прямая УВ с падающим импульсом давления Обратная ВИЭР, отраженная от ГМ Прямая ВИЭС, отраженная от ударника

Процесс упругопластического деформирования в твердых телах также протекает в соответствии с законами открытых систем [16]. Чтобы обеспечить деформирование без разрушения материала (или с минимальными разрушениями), необходимо создать такую конструкцию материала, в которой повышение энтропии, согласно теореме Пригожина–Климонтовича об открытых системах, было бы минимальным. Градиентные материалы как раз и позволяют существенно снижать общий прирост энтропии в деформируемом теле и тем самым контролировать поведение системы в неравновесном состоянии.

Проиллюстрируем это на следующих расчетных примерах.

На рис. 5 приведен расчет удара стального ударника со скоростью $V = 1000$ м/с по стальной преграде, покрытой слоем более легкого материала. Из рис. 5,б видно, что в этом случае разрушение наименьшее и в бойке и в преграде, т.е. при той же энергии удара удалось сформировать более устойчивое внутреннее состояние системы.

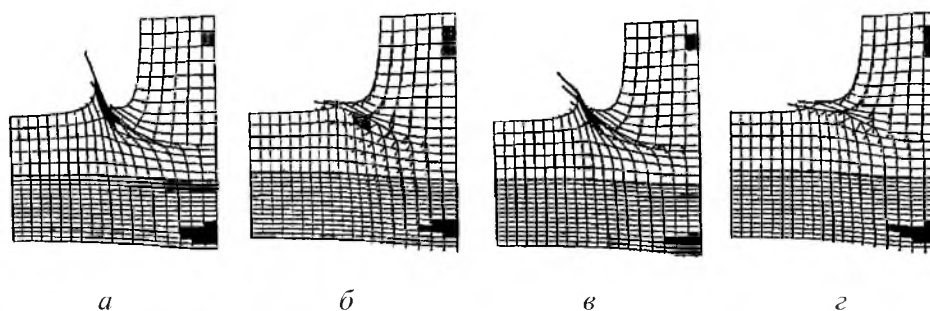


Рис. 5. Удар стального ударника по биметаллической пластине с градиентным слоем на основе Al-Fe, 12-я мкс взаимодействия: а – чистый алюминий; б – градиентный слой от стали к алюминию; в – градиентный слой от алюминия к стали; г – образец полностью стальной.

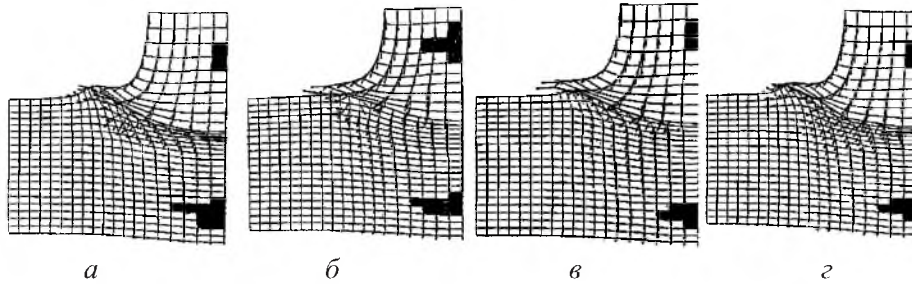


Рис. 6. Поле скоростей и зоны разрушения в осевом сечении ударника и преграды на 12-й мкс взаимодействия при скорости соударения 1000 м/с: *a* – сталь → сталь; *б* – сталь → W ~ Fe-сталь; *в* – сталь → Fe ~ W-сталь; *г* – сталь → Fe_{80,2}Si_{19,8}-сталь.

На рис. 6 показаны те же варианты сборок, но алюминий заменен на вольфрам и железокремниевую керамику. Казалось бы, использование более прочного и тяжелого материала должно повысить защитные свойства еще больше, однако этого не произошло. Согласно синергетическим представлениям в неравновесных системах, как и в случае высокоскоростного удара, устойчивость системы определяется скоростью прироста энтропии: чем ниже прирост, тем система устойчивее. В данном случае композиция алюминий–железо дала меньший прирост энтропии, чем композиция вольфрам–железо, поэтому ее защитные свойства оказались выше.

Выводы

1. Предложена схема компьютерного конструирования материалов с градиентным распределением физико-механических свойств.
2. Проанализированы ударно-волновые процессы в ГМ и установлены основные закономерности трансформации ударных волн в неоднородных средах.
3. Установлено, что образующиеся в ГМ волны изоэнтропического сжатия и волны изоэнтропической разгрузки приводят к понижению суммарной энтропии при ударном деформировании. Это свойство ГМ позволяет использовать их в качестве эффективной защиты от ударных воздействий.

Резюме

Розглянуто методику комп'ютерного конструювання матеріалу, що має підвищені міцнісні властивості, на основі використання багатокомпонентних систем із градієнтним розподілом концентрації компонент. Показано, що згідно з синергетичним уявленням про ударно-деформівний матеріал як про відкриту систему за допомогою градієнтних матеріалів можна здійснити контроль за поведінкою навантаженого матеріалу, що перебуває в нерівноважному стані. Використання градієнтних матеріалів при інтенсивному динамічному навантаженні (удар, вибух) дозволяє підвищити стійкість системи за рахунок зменшення загального приросту ентропії, що узгоджується з теоремою Пригожина–Климонтовича.

1. *Векишинский С. А.* Новый метод металлографического исследования сплавов. – М.: Гостехиздат, 1944. – 262 с.
2. *Новожилов Н. М.* Изготовление и применение в машиностроении сплавов переменного состава. – М.: Машиностроение, 1987. – 80 с.
3. *Кректулева Р. А., Платова Т. М.* Моделирование поведения многокомпонентных материалов в ударной волне // Детонация: Материалы II Всесоюз. сов. по детонации. – Черногоровка, 1981. – С. 98 – 101.
4. *Кректулева Р. А.* Методы компьютерного конструирования функционально-градиентных материалов с учетом мезоскопических явлений // Порошк. металлургия. – 1999. – № 11-12. – С. 9 – 14.
5. *Айтуров Е. Е., Кректулева Р. А., Платова Т. М.* Построение уравнения состояния Fe–Ni сплавов на основе метода кластерных компонентов // Инж.-физ. сб. – Томск: Изд-во Томск. ун-та, 1989. – С. 83 – 90.
6. *Герасимов А. В., Кректулева Р. А.* Математическая модель поведения многокомпонентного пористого упругопластического тела при динамическом нагружении // Пробл. прочности. – 1999. – № 2. – С. 139 – 150.
7. *Бежин О. Н., Косяков В. А., Кректулева Р. А.* Формирование тепловых локализованных структур в сварочном шве при импульсно-дуговой сварке неплавящимся электродом // Прикл. механика и теорет. физика. – 1998. – 39, № 6. – С. 172 – 177.
8. *Бежин О. Н., Губенко Л. В., Косяков В. А.* Моделирование тепловых процессов при различных методах обработки поверхности концентрированными источниками энергии // Материалы V Всерос. науч.-техн. конф. “Механика летательных аппаратов и современные материалы”. – Томск, 1998. – С. 92 – 94.
9. *Герасимов А. В., Кректулева Р. А.* Численное моделирование деформирования и разрушения функционально градиентных и пористых материалов при взрывном и ударном нагружении // Механика композиционных материалов и конструкций. – 1999. – 5, № 3. – С. 94 – 106.
10. *Панин В. Е.* Методология физической мезомеханики как основа построения моделей в компьютерном конструировании материалов // Изв. вузов. Физика. – 1995. – 38, № 11. – С. 6 – 25.
11. *Мурр Л. Е.* Микроструктура и механические свойства металлов и сплавов после нагружения ударными волнами // Ударные волны и явления высокоскоростной деформации металлов. – М.: Металлургия, 1984. – С. 202 – 241.
12. *High-Velocity Impact Phenomena / R. Kinslow (Ed.).* – New York, London: Academic Press, 1970.
13. *Баканова А. А., Дудолодов И. П., Сутулов Ю. Н.* Выполнение правила аддитивности для ряда сплавов при ударном сжатии // Прикл. механика и теорет. физика. – 1972. – № 6. – С. 167 – 171.
14. *Герасимов А. В., Кректулева Р. А.* Поведение материалов с градиентными упрочняющими покрытиями при интенсивных динамических нагрузках // Перспективные материалы. – 1997. – № 6. – С. 13 – 18.

15. *Крекулева Р. А.* Закономерности трансформирования плоских ударных волн в градиентных средах // *Механика деформируемого твердого тела.* – Томск: Изд-во Томск. ун-та, 1992. – С. 35 – 40.
16. *Иванова В. С., Кузеев И. Р., Закерничная М. М.* Синергетика и фракталы. Универсальность механического поведения материалов. – Уфа: Изд-во УГНТУ, 1998. – 363 с.

Поступила 19. 09. 2002