

С. Б. Полотняк (г. Киев)

Методика численного моделирования процессов мартенситных фазовых превращений в малых объемах материалов при деформировании на алмазных наковальнях

Разработаны модель, алгоритм и программное обеспечение для конечноэлементного моделирования фазового превращения мартенситного типа в малом объеме материала образца при деформировании в квазигидростатических условиях (в гаскетке без передающей давление среды) на алмазных наковальнях аппарата сверхвысокого давления, которые базируются на термомеханической теории фазовых превращений в неупругих материалах, разработанной проф. В. И. Левитасом. Предложен алгоритм моделирования кинетики процесса фазового превращения, состоящий в циклическом решении контактной упруго-пластической задачи, оценке возможности протекания фазового превращения и повторном решении задачи с учетом фазовой деформации.

Ключевые слова: алмазные наковальни, мартенситные фазовые переходы, компьютерное моделирование, метод конечных элементов.

Введение. Развитие техники высоких давлений дает в руки исследователей новые способы воздействия на структуру твердых тел, возможность направленного изменения их физических и эксплуатационных характеристик. Непосредственным результатом действия высокого давления является сжатие вещества (увеличение его плотности) и энергетически выгодным становится то направление физических и химических процессов, которое в соответствии с принципом Ле Шателье-Брауна приводит к уменьшению объема вещества (при условии сохранения массы). Уменьшение межатомных (межмолекулярных) расстояний при сжатии приводит, в конечном счете, к деформации молекул и внешних электронных оболочек атомов, к изменению характера межатомных взаимодействий, что неизбежно сказывается на физических и химических свойствах вещества. Например, при статическом сжатии многие вещества испытывают полиморфные превращения с образованием новых кристаллических форм, происходят переходы диэлектрика в состояние с металлической проводимостью, у кристаллических тел увеличивается пластичность (вследствие залечивания дефектов структуры в процессе деформирования). Кроме того, высокие давления оказывают существенное влияние на кинематику протекающих в веществах процессов.

Фазовые превращения, протекающие в малых объемах образцов при их деформировании в гаскетке аппарата сверхвысокого давления с алмазными наковальнями (DAC) без передающей давление среды (рис. 1), имеют практически “мгновенный” характер и сопровождаются резким изменением объема материала и, соответственно, изменением всех его физико-механических свойств [1—4]. В литературе такие превращения классифицируют как мар-

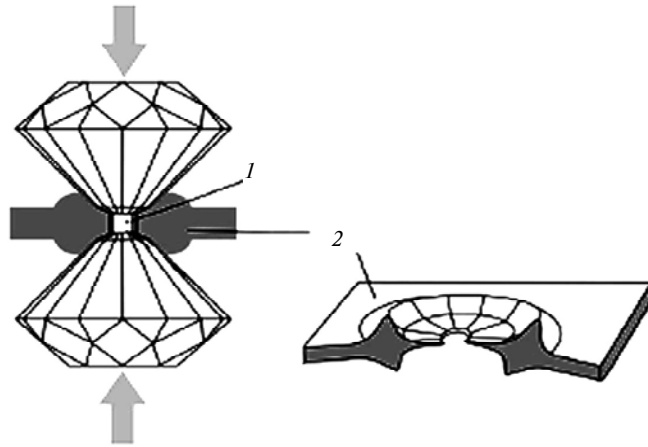


Рис. 1. Деформирование образца (1), заключенного в гasketку (2) из нержавеющей стали, при комнатной температуре в DAC.

тензитные бездиффузионные или как полиморфные фазовые превращения первого рода, при которых изменение взаимного расположения составляющих кристалл атомов (или молекул) происходит путем их упорядоченного перемещения, причем относительные смещения соседних атомов малы по сравнению с междуатомным расстоянием. Для таких превращений величина деформации мала и соответственно мал, по сравнению с энергией связи в кристалле, энергетический барьер, препятствующий однородному переходу исходной фазы в конечную. Необходимое условие мартенситного превращения — сохранение упорядоченного контакта между фазами. Упорядоченное строение межфазных границ при малости барьера для однородного фазового перехода обеспечивает их малую энергию и высокую подвижность. Как следствие, избыточная энергия, необходимая для зарождения кристаллов новой фазы (мартенситных), мала и при некотором отклонении от равновесия фаз становится сопоставимой с энергией дефектов, присутствующих в исходной фазе. Поэтому зарождение мартенситных кристаллов происходит с большой скоростью и может не требовать тепловых флуктуаций. Вследствие воздействия образовавшейся фазы на исходную энергетический барьер для перемещения границы фаз существенно меньше, чем для однородного перехода; при небольших отклонениях от равновесия он исчезает — кристалл растет со скоростью порядка звуковой и без тепловой активации.

Практически все фазовые превращения мартенситного типа (далее ФП) с фазовой деформацией, превышающей 0,5 %, сопровождаются пластическими деформациями. Процессы пластической релаксации, связанные с зарождением и перемещением дислокаций, делают превращения существенно необратимыми (между прямым и обратным превращением возникает значительный гистерезис). “Оседание” дислокаций на межфазных границах уменьшает их подвижность и увеличивает их энергию, соответственно, растет барьер для зарождения. Чем больше степень релаксации, тем при меньших отклонениях от точки истинного равновесия фаз может проходить превращение, но тем меньше его скорость и менее отчетливо проявляется закономерный характер продуктов превращения. В одном и том же материале, в зависимости от степени отклонения от точки истинного равновесия фаз и скорости релаксации, наблюдаются кинетически и структурно различные варианты превращения

(быстрые “атермические”, изотермические, “нормальные”, по кинетике подобные кристаллизации). Таким образом, ФП в упруго-пластических материалах являются сложным термомеханическим процессом, сопровождающимся изменением механических свойств, фазовой деформацией, сложным распределением локальных напряжений и деформаций. Серьезные затруднения термомеханического описания процесса мартенситного фазового превращения в упруго-пластических материалах при высоких давлениях обусловлены неопределенностью условия ФП, сложностью формулирования краевой задачи и значительной трудоемкостью ее численного решения.

При описании ФП в упругих материалах обычно используют принцип минимума свободной энергии Гиббса. Для случая неупругих материалов такого закона не существует и теория ФП неупругого твердого тела находится в начальной стадии своего развития. Известны результаты решения ряда простых модельных задач о появлении зародыша новой фазы [5—8]. Практически во всех этих работах для получения критерия ФП и экстремального принципа для определения неизвестных параметров используют, как и в случае ФП в упругих материалах, минимизацию свободной энергии Гиббса. Однако для упруго-пластических материалов необходимо дополнительно учитывать диссипацию энергии вследствие пластической деформации, а также траекторию деформирования. В [9, 10] максимизируют величину работы превращения с использованием локальных напряжений в области ФП, однако до протекания последнего. Так как в ходе ФП вследствие фазовой деформации величина напряжений изменяется очень сильно и даже изменяет свой знак [6, 11—13], то это может приводить к значительной погрешности решения. Существует также ряд подходов к изучению закономерностей процесса фазового превращения, использующих в определяющих соотношениях параметр концентрации новой фазы и кинетические уравнения ее изменения [10, 14—17]. Однако такие подходы не могут быть использованы для описания мгновенно происходящего мартенситного ФП, сопровождающегося резким изменением всех физико-механических свойств материала. Известно всего несколько подходов для численного моделирования таких процессов в упруго-пластических материалах [9, 18, 19]. Типичным для этих работ является то, что предложенные в них критерии фазового превращения не базируются на использовании второго закона термодинамики и не рассматривают диссипацию энергии вследствие ФП, что делает крайне затруднительным понимание физического смысла этих критериев и, следовательно, ставит под сомнение справедливость предложенных подходов.

Термомеханическая теория фазовых превращений в неупругих материалах [20—25] представляется наиболее приемлемой для описания ФП в материалах при их деформировании в ДАС. Несмотря на ряд допущений, принятых при выводе определяющих соотношений, предложенный там критерий ФП в упруго-пластических материалах получен с использованием второго закона термодинамики и является наиболее термодинамически обоснованным, а для определения всех неизвестных параметров на основании термомеханического постулата — постулата реализуемости — получен новый экстремальный принцип. Поэтому целью настоящего исследования была разработка конечноэлементной методики моделирования процессов ФП мартенситного типа в малых объемах материалов, деформируемых в ДАС.

Методика моделирования процессов мартенситных фазовых превращений, протекающих в малых объемах материалов при деформировании на алмазных наковальнях

Как отмечалось выше, мартенситные ФП, протекающие в кристаллических материалах при деформировании в ДАС с использованием гаскетов, но без передающей давление среды, осуществляются путем упорядоченного перемещения составляющих кристалл атомов (или молекул), причем при этом относительные смещения соседних атомов малы по сравнению с межатомным расстоянием. Будем считать, что перестройка кристаллической решетки в микрообластях сводится к деформации ее ячейки и конечная фаза может рассматриваться как однородно деформированная исходная фаза. Для описания процесса ФП применим термомеханическую теорию ФП в неупругих материалах [20—25]. С помощью данного подхода разработана конечноэлементная методика, базирующаяся на использовании термодинамически обоснованного критерия фазового превращения в упруго-пластических материалах и экстремального принципа для определения всех неизвестных параметров.

Критерий фазового перехода. Рассмотрим объем V многофазного материала с заданными граничными условиями по поверхности S . Пусть в малом объеме $V_n \in V$ с границей Σ_n в момент времени Δt происходит фазовый переход. Считаем, что в каждой точке объема V_n справедлив второй закон термодинамики, записанный в виде неравенства Планка:

$$D = \sigma : \dot{\varepsilon} - \rho \dot{\psi} - \rho s \dot{\theta} \geq 0. \quad (1)$$

Здесь D — скорость диссипации в единичном объеме; ρ — удельная плотность материала; s — энтропия; ψ — удельная свободная энергия Хелмгольца; σ и ε — тензоры напряжений и деформаций соответственно; θ — температура. ФП рассматриваем как термомеханический процесс роста фазовой деформации от начальной к конечной величине, сопровождаемый изменением всех свойств материала. Общее приращение диссипации в течение ФП в каждой трансформирующейся материальной точке определяется следующим образом:

$$N = \int_t^{t+\Delta t} D dt = \int_{\varepsilon_1}^{\varepsilon_2} \sigma : d\varepsilon - \Delta\psi - \int_{\theta_1}^{\theta_2} \rho s d\theta, \quad (2)$$

где $\Delta\psi = \rho(\psi_2 - \psi_1)$. Индексы 1 и 2 соответствуют начальной и конечной стадии ФП соответственно. Предположим, что при ФП происходят два диссипативных процесса: непосредственно сам ФП и пластическое течение. Тогда приращение диссипации в ходе превращения вследствие пластического течения (при условии независимости свободной энергии от пластической деформации) можно записать в виде

$$N_p = \int_{\varepsilon_{p1}}^{\varepsilon_{p2}} \sigma : d\varepsilon, \quad (3)$$

где ε_p — пластическая деформация. Приращение диссипации X вследствие самого фазового превращения (т. е. движущая сила для ФП) есть разница между N и N_p . Полагая, что в ходе ФП не происходит изменения температуры

(при разложении $\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}_e + \boldsymbol{\varepsilon}_p + \boldsymbol{\varepsilon}_f$, где $\boldsymbol{\varepsilon}_e$ и $\boldsymbol{\varepsilon}_f$ — упругая и фазовая деформации), получим

$$X = N - N_p = \int_{\boldsymbol{\varepsilon}_1}^{\boldsymbol{\varepsilon}_2} \boldsymbol{\sigma} : d(\boldsymbol{\varepsilon}_e + \boldsymbol{\varepsilon}_f) - \Delta\psi. \quad (4)$$

Простейшее предположение о взаимной независимости обоих диссипативных процессов приводит к условию, что приращение диссипации в ходе каждого из них должно быть неотрицательным, в частности, $X \geq 0$. Следовательно, при $X < 0$ фазовый переход невозможен. Условие $X = 0$ является критерием превращения без диссипации вследствие ФП, так как ФП возможен (не противоречит второму закону термодинамики) и приращение диссипации из-за ФП равно нулю. Так как практически все мартенситные превращения, даже в упругих телах, сопровождаются диссипацией и гистерезисом, критерий фазового перехода должен быть записан в виде

$$X = k. \quad (5)$$

Здесь k — экспериментально определяемая величина диссипации энергии вследствие ФП, которая может зависеть от параметров θ , $\boldsymbol{\varepsilon}_p$. При $X < k$ ФП невозможен.

Пусть в некотором объеме V_n происходит фазовый переход, тогда для каждой точки в этом объеме должен выполняться критерий ФП (5). Интегрируя данный критерий по объему V_n , получаем необходимое условие зародышеобразования:

$$\int_{V_n} X dV_n = \int_{V_n} k dV_n, \quad (6)$$

или с учетом выражения (4) для приращения диссипации X получаем

$$\int_{\boldsymbol{\varepsilon}_1}^{\boldsymbol{\varepsilon}_2} \int_{V_n} \boldsymbol{\sigma} : d(\boldsymbol{\varepsilon}_e + \boldsymbol{\varepsilon}_f) dV_n - \int_{V_n} \Delta\psi dV_n - \int_{V_n} k dV_n = 0. \quad (7)$$

Выражение (7) имеет одинаковую форму для ФП в упругих и упруго-пластических материалах. Пластичность оказывает влияние на изменение $\boldsymbol{\sigma}$ в ходе ФП и величину k . Если записать

$$\rho\psi_i = 0,5 \boldsymbol{\varepsilon}_{ei} : \mathbf{E}_i : \boldsymbol{\varepsilon}_{ei} + \rho\psi_i^0, \quad i = 1, 2 \text{ и } \mathbf{E}_1 = \mathbf{E}_2, \quad (8)$$

где \mathbf{E}_i — тензоры упругих модулей i -й фазы, ψ_i^0 — температурная составляющая свободной энергии, тогда

$$\int_{\boldsymbol{\varepsilon}_{e1}}^{\boldsymbol{\varepsilon}_{e2}} \boldsymbol{\sigma} : d\boldsymbol{\varepsilon}_e = \int_{\boldsymbol{\varepsilon}_{e1}}^{\boldsymbol{\varepsilon}_{e2}} \boldsymbol{\varepsilon}_e : \mathbf{E} : d\boldsymbol{\varepsilon}_e = 0,5 (\boldsymbol{\varepsilon}_{e2} : \mathbf{E} : \boldsymbol{\varepsilon}_{e2} - \boldsymbol{\varepsilon}_{e1} : \mathbf{E} : \boldsymbol{\varepsilon}_{e1})$$

и выражение (7) примет вид

$$\int_{V_n} \int_{\boldsymbol{\varepsilon}_{f1}}^{\boldsymbol{\varepsilon}_{f2}} \boldsymbol{\sigma} : d\boldsymbol{\varepsilon}_f dV_n - \int_{V_n} \Delta\psi^0 dV_n - \int_{V_n} k dV_n = 0. \quad (9)$$

Таким образом, упругие деформации также пропадают. Для случая, когда фазовая деформация является чисто объемной, т. е. $\boldsymbol{\varepsilon}_f = \varepsilon_0 \mathbf{I}$, где \mathbf{I} — единичный тензор, $3\varepsilon_0$ — объемная деформация превращения, получим $\boldsymbol{\sigma} : d\boldsymbol{\varepsilon}_f = 3\bar{\sigma}_0 d\varepsilon_0$ (здесь $\bar{\sigma}_0$ — гидростатическое давление). Если распределение температуры, объемной деформации превращения и параметра k однородно по объему V_n , тогда выражение (9) может быть записано в виде

$$\bar{X} = \int_0^{\varepsilon_{02}} 3\bar{\sigma}_0 d\varepsilon_0 - \Delta\Psi^0 = k; \quad \bar{\sigma}_0 = \frac{1}{V_n} \int \sigma_0 dV_n. \quad (10)$$

Здесь $\bar{\sigma}_0$ — осредненное по объему V_n давление, \bar{X} — движущая сила фазового превращения (осредненная по объему V_n величина приращения диссипации X вследствие непосредственно самого превращения). Выражение (10) является конечной формой критерия ФП, который будет использован в данной работе. Приращение температурной составляющей свободной энергии $\Delta\Psi_i^0$ может быть получено с использованием выражений [26]

$$\begin{aligned} \Psi_1^0 &= \Psi_{01} - s_{01}(\theta - \theta_0) - v_1\theta \left(\ln \frac{\theta}{\theta_0} - 1 \right) - v_1\theta_0; \\ \Psi_2^0 &= \Psi_{02} - s_{02}(\theta - \theta_0) - v_2\theta \left(\ln \frac{\theta}{\theta_0} - 1 \right) - v_2\theta_0, \end{aligned} \quad (11)$$

где $v_1 > 0$ и $v_2 > 0$ — удельное тепло, s_{01} , s_{02} , Ψ_{01} , Ψ_{02} — некоторые константы материала, θ_0 — референсная температура. Следует отметить, что в этом случае фазовый переход рассматриваем как рост объемной деформации превращения от нуля до некоторой величины ε_0 (которая является постоянной для данного превращения), сопровождающийся резким изменением температурных свойств материала.

Экстремальный принцип для определения неизвестных параметров.

Для определения всех неизвестных параметров \mathbf{b} (положение, форма и ориентация зародыша, $\boldsymbol{\varepsilon}_f$, ε_2 и др.) используем постулат реализуемости [27]: если, начиная от состояния без ФП, которое можно описать выражением

$$F(\mathbf{b}^*) = \int_{V_n^*} (X(\mathbf{b}^*) - k(\mathbf{b}^*)) dV_n < 0 \quad (12)$$

для всех возможных параметров ФП \mathbf{b}^* , в процессе изменения краевых условий для некоторого параметра \mathbf{b} начинает выполняться условие ФП (5), тогда образование зародыша будет происходить с этим \mathbf{b} .

Если в ходе вариации краевых условий критерий (5) выполняется для одного или нескольких \mathbf{b} , тогда для произвольного другого \mathbf{b}^* неравенство (12) также должно выполняться, так как в противоположном случае для этого \mathbf{b}^* условие (5) должно было быть выполнено ранее, чем для \mathbf{b} .

Таким образом, для определения всех неизвестных параметров \mathbf{b} получаем экстремальный принцип

$$\int_{V_n^*} (X(\mathbf{b}^*) - k(\mathbf{b}^*)) dV_n < 0 = \int_{V_n} (X(\mathbf{b}) - k(\mathbf{b})) dV_n. \quad (13)$$

Или иначе:

$$F(\mathbf{b}^*) \rightarrow \max, F(\mathbf{b}) = 0.$$

Из условия (13), используя (7), получаем

$$\begin{aligned} \int_{\varepsilon_1 V_n^*}^{\varepsilon_2^*} \int_{V_n^*} \boldsymbol{\sigma}^* : d(\boldsymbol{\varepsilon}_e^* + \boldsymbol{\varepsilon}_f^*) dV_n^* - \int_{V_n^*} \Delta \Psi^* dV_n^* - \int_{V_n^*} k^* dV_n^* < 0 = \\ = \int_{\varepsilon_1 V_n}^{\varepsilon_2} \int_{V_n} \boldsymbol{\sigma} : d(\boldsymbol{\varepsilon}_e + \boldsymbol{\varepsilon}_f) dV_n - \int_{V_n} \Delta \Psi dV_n - \int_{V_n} k dV_n. \end{aligned} \quad (14)$$

Для случая критерия ФП в виде (10) можно записать следующие выражения:

$$\int_0^{\varepsilon_{02}} 3\bar{\sigma}_0^* d\varepsilon_0 - \Delta \Psi^0 - k < 0 = \int_0^{\varepsilon_{02}} 3\bar{\sigma}_0 d\varepsilon_0 - \Delta \Psi^0 - k; \quad (15)$$

$$\bar{\sigma}_0^* = \frac{1}{V_n^*} \int_{V_n^*} \sigma_0^* dV_n. \quad (16)$$

Так как значение интеграла работы $\varphi = \int_0^{\varepsilon_{02}} 3\bar{\sigma}_0 d\varepsilon_0$ зависит только от объема зародыша новой фазы (его расположения и формы) и изменения осредненного по объему V_n давления, то согласно принципу максимума (15)

$$\varphi(V_n^*, \bar{\sigma}_0^*) \rightarrow \max. \quad (17)$$

Следует отметить, что в данном подходе величина объемной деформации фазового превращения $\varepsilon_0(\mathbf{r})$ (где \mathbf{r} — радиус-вектор положения точки) изменяется от нуля до своего предельного значения ε_{02} только в некотором объеме V_n . В остальном объеме материала, величина $\varepsilon_0(\mathbf{r})$ остается неизменной.

Основной смысл данного принципа максимума состоит в следующем: если только некоторый диссипативный процесс (пластическое течение или фазовое превращение) может произойти — он будет происходить, т. е. первое выполнение необходимого энергетического условия является достаточным для начала протекания диссипативного процесса.

Система определяющих уравнений и конечноэлементная методика моделирования фазовых переходов мартенситного типа в материалах при деформировании в ДАС. Суммируя вышесказанное, систему определяющих соотношений для моделирования процесса мартенситного ФП в упруго-пластических материалах при допущениях, что поведение новой и старой фаз описывается стандартной упругопластической моделью на основе условия пластического течения Мизеса, упругие свойства обеих фаз одинаковы [9, 18, 19], фазовая деформация является чисто объемной, граница раздела фаз когерентна (перемещения при пересечении границы фаз непрерывны), можно записать следующим образом:

- уравнения равновесия;
- кинематическое разложение полной деформации;

- закон Гука для упругой области;
- условие пластического течения Мизеса;
- ассоциированный закон пластического течения;
- критерий фазового перехода (10);
- принцип максимума (17).

Таким образом, для моделирования процесса ФП в упруго-пластическом материале следует вычислять интеграл работы в уравнении (10) и рассчитывать изменение распределения локальных напряжений в зависимости от изменения фазовой деформации превращения. Для этого необходимо решать стандартную контактную упруго-пластическую задачу с заранее заданной объемной деформацией фазового превращения. Поэтому был выполнен комплекс работ по разработке на основе существующего в Институте сверхтвердых материалов им. В. Н. Бакуля НАН Украины программного обеспечения [28—31] программного комплекса “Термомеханика 2” для численного, с использованием метода конечных элементов (МКЭ), решения контактных термоупруго-пластических задач по теории пластического течения при малых и конечных деформациях с учетом влияния высоких давлений и наличия фазовых превращений. В комплекс прикладных программ [29] была интегрирована библиотека изопараметрических конечных элементов [28], содержащая линейные, квадратичные, кубические и ряд переходных элементов и проведена адаптация всех подпрограмм пакета к новым процедурам формирования и решения системы уравнений МКЭ, а также вычисления полей напряжений и деформаций в соответствии с изменившейся схемой интегрирования определяющих уравнений. Разработаны и протестированы два модуля — пре- и постпроцессор, предназначенные для автоматизации процесса конечноэлементного разбиения исследуемых областей, введения двойных линий для контактирующих тел (препроцессор) и визуализации получаемых в результате проведения расчетов параметров термомеханического состояния конструкции (постпроцессор). Разработанный программный продукт адаптирован для использования в среде Windows 2k, Windows XP. Проведенное тестирование программного комплекса показало увеличение точности получаемых результатов и снижение времени расчета задач за счет использования при дискретизации расчетных областей конечных элементов, имеющих более высокую степень аппроксимации перемещений, деформаций и напряжений.

В основу программного обеспечения положены модели поведения материалов, описанные в [32, 33]. Приняты следующие допущения: при нормальном давлении упругие деформации малы, при высоком давлении сдвиговые упругие деформации малы, а объемная упругая деформация конечна. Замкнутая система определяющих соотношений в деформированном текущем состоянии по теории пластического течения при конечных деформациях в единой декартовой системе координат имеет следующий вид [32]:

1. Уравнение равновесия:

$$\frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial \mathbf{x}} + \rho \mathbf{f} = 0. \quad (18)$$

2. Кинематические уравнения:

$$\mathbf{d} = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \mathbf{x}} + \left(\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \mathbf{x}} \right)^t \right] = \frac{\mathbf{V}}{a^2} + \mathbf{d}_\theta + \mathbf{d}_p, \quad \mathbf{W} = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \mathbf{x}} - \left(\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \mathbf{x}} \right)^t \right]; \quad (19)$$

$$\mathbf{d}_0 = \frac{\dot{\alpha}\theta}{1+\alpha\theta} \mathbf{I}, \quad a^2 = 1 + \frac{2}{3} \mathbf{I}_1(\mathbf{B}_e), \quad \overset{\vee}{\mathbf{B}}_e = \dot{\mathbf{B}}_e + 2(\mathbf{B}_e \cdot \mathbf{W}). \quad (20)$$

Нелинейность кинематического разложения (19) обусловлена наличием конечных объемных упругих деформаций.

3. Физические соотношения:

— в упругой области ($F(\boldsymbol{\sigma}, q, \theta) = \sigma_i - \Phi(q, \theta)(1 + \kappa\sigma_0) < 0$):

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{E} : \mathbf{B}_e = \lambda(\mathbf{B}_e : \mathbf{I})\mathbf{I} + 2\mu\mathbf{B}_e \quad (21)$$

или в скоростях с учетом (19):

$$\overset{\vee}{\boldsymbol{\sigma}} = a^2 \mathbf{E} : (\mathbf{d} - \mathbf{d}_0) + \dot{\mathbf{E}} : \mathbf{B}_e, \quad \dot{\mathbf{E}} = a^2 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial \mathbf{I}_1(\mathbf{B}_e)} [\mathbf{I} : (\mathbf{d} - \mathbf{d}_0)] + \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial \theta} \dot{\theta};$$

— в упруго-пластической области ($F = 0$):

$$\overset{\vee}{\boldsymbol{\sigma}} = \left(\mathbf{E} - \frac{a^2}{N} \mathbf{E} : \mathbf{S} \frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{\sigma}} : \mathbf{E} \right) : (\mathbf{d} - \mathbf{d}_0) + \dot{\mathbf{E}} : \mathbf{B}_e - \frac{1}{N} \left(a^2 \frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{\sigma}} : \dot{\mathbf{E}} : \mathbf{B}_e + \frac{\partial F}{\partial \theta} \dot{\theta} \right) \mathbf{E} : \mathbf{S};$$

$$N = a^2 \frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{\sigma}} : \mathbf{E} : \mathbf{S} - \frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{\sigma}} \left(\frac{2}{3} \mathbf{S} : \mathbf{S} \right)^{1/2}, \quad (22)$$

где \mathbf{x} — радиус-вектор точки в деформированной конфигурации; $\mathbf{U} = \dot{\mathbf{x}}$ — вектор скорости; \mathbf{d} , \mathbf{d}_0 , \mathbf{d}_p — тензоры скорости полной, термической и пластической деформаций, соответственно; f — массовые усилия; ρ — плотность материала; $\mathbf{U}_0 = (1 + \alpha\theta)\mathbf{I}$ — тензор термической деформации, θ —

температура, \mathbf{I} — единичный тензор, $\dot{\alpha}\theta = \dot{\alpha}\theta + \alpha\dot{\theta}$; $\boldsymbol{\sigma}$ — тензор истинных напряжений Коши; \mathbf{B}_e — тензор упругой деформации; \mathbf{W} — тензор вихря, характеризующий скорость поворота точки по отношению к текущей конфигурации; $\overset{\vee}{\boldsymbol{\sigma}}$, $\overset{\vee}{\mathbf{B}}_e$ — производная Яумана тензоров напряжений и упругой деформации соответственно; $\mathbf{I}_1(\mathbf{B}_e)$ — первый инвариант тензора \mathbf{B}_e ; $F(\boldsymbol{\sigma}, q, \theta)$ — поверхность нагружения; $\sigma_i = \left(\frac{3}{2} \mathbf{S} : \mathbf{S} \right)^{1/2}$ — интенсивность

напряжений; $\mathbf{S} = \text{dev } \boldsymbol{\sigma}$ — девиатор тензора напряжений; $q = \int \left(\frac{2}{3} \mathbf{d}_p : \mathbf{d}_p \right)^{1/2}$

— величина накопленной в процессе деформирования пластической деформации; $\sigma_0 = \frac{1}{3} \mathbf{I}_1(\boldsymbol{\sigma})$ — давление; $\Phi(q, \theta)(1 + \kappa\sigma_0)$ — экспериментально определяемая зависимость предела текучести для материала, κ — константа материала (при нормальном давлении $1 + \kappa\sigma_0 \approx 1$); \mathbf{E} — тензор упругих постоянных; λ , μ — константы Ламе; $\mathbf{I} : \mathbf{d}_p = 0$ — условие пластической несжимаемости; точки над величинами обозначают производную по времени.

4. Контактные условия (записываются для деформированного состояния в локальной системе координат):

$$\sigma_n^1 = -\sigma_n^2 \leq 0, \sigma_e^1 = \sigma_e^2; e = \bar{i}, \bar{j}; \quad (23)$$

$$U_n^1 - U_n^2 \leq \delta_n, (U_n^1 - U_n^2 - \delta_n)T_n^1 = 0; \quad (24)$$

если $\frac{1}{\gamma}|\sigma_e| + \sigma_n < 0$, то

$$\dot{U}_e^1 - \dot{U}_e^2 = 0; \quad (25)$$

если $\frac{1}{\gamma}|\sigma_e| + \sigma_n = 0$, то

$$(\dot{U}_e^2 - \dot{U}_e^1 - \lambda_2 \sigma_e^1) \sigma_e^1 = 0, \lambda_2 \geq 0, \quad (26)$$

где σ_n, σ_e — нормальные и касательные к поверхности контакта напряжения, $\sigma_n = \sigma_{pr} n_p n_r$; $\sigma_e = \sigma_{pr} n_p l_r$; $p, r = 1, 2, 3$; $l = \bar{i}, \bar{j}$; $n_p, \bar{i}_p, \bar{j}_p, p = 1, 2, 3$ — компоненты нормального к поверхности контакта первого тела и касательного единичных векторов, которые образуют локальный базис; индексы 1 и 2 обозначают принадлежность к первому и второму телу соответственно; $U_n, \dot{U}_n, U_e, \dot{U}_e$ — компоненты векторов перемещений и скорости перемещений в локальной системе координат соответственно; γ — коэффициент трения; δ_n — натяг.

Система уравнений (18)—(26), дополненная граничными условиями в напряжениях или перемещениях, представляет собой полную систему уравнений для решения контактных термоупруго-пластических задач.

Отметим некоторые особенности конечноэлементной реализации применяемой методики. В методике использован единый подход к решению упруго-пластических задач по теории пластического течения при малых и больших деформациях модифицированным методом начальных напряжений с пошаговым итерационным алгоритмом. При этом переход от случая малых деформаций к конечным связан лишь с незначительной модификацией итерационной процедуры.

Конечноэлементная постановка упруго-пластической задачи при малых деформациях, записанная в приращениях, имеет следующий вид:

— уравнение равновесия:

$$\int_V [B]^T \{\sigma\} dV = \{q\}; \quad (27)$$

— геометрические соотношения:

$$\{\Delta \epsilon\} = [B] \{\Delta U\}; \quad (28)$$

$$\{\Delta \epsilon\} = \{\Delta \epsilon^e\} + \{\Delta \epsilon^p\} + \{\Delta \epsilon^0\}, \quad (29)$$

где $\{\epsilon^p\}$ — вектор пластических деформаций;

— физические соотношения:

$$\begin{aligned} \{\Delta \sigma\} = & \left[[D_2] - \frac{\bar{\alpha}}{\nu} [D_2] \{\Psi\} \left\{ \frac{dF}{d\sigma} \right\}^T [D_2] \right] (\{\Delta \epsilon\} - \{\Delta \epsilon^0\}) + \\ & + \left(([D_2] - [D_1]) \{\epsilon^e\} - \frac{\bar{\alpha}}{\nu} \left[\left\{ \frac{dF}{d\sigma} \right\}^T ([D_2] - [D_1]) \{\epsilon^e\} + \frac{dF}{d\theta} \Delta \theta [D_2] \{\Psi\} \right] \right); \end{aligned} \quad (30)$$

$$\vartheta = \left\{ \frac{dF}{d\sigma} \right\}^T [D_2] \{ \Psi \} - \frac{dF}{dq} \left(\frac{2}{3} \{ \Psi \}^T \{ \Psi \} \right)^{\frac{1}{2}},$$

где параметр $\bar{\alpha} = 0$ в упругой области и $\bar{\alpha} = 1$ в упруго-пластической области; $F = F(\sigma_{ij}, q, \theta)$ — функция нагружения; Ψ — функция текучести; $[D_1], [D_2]$ — матричное представление компонент тензора упругих постоянных \bar{E}_{ijmn} и E_{ijmn} соответственно.

Для изотропного материала в случае зависимости упругих характеристик от первого инварианта упругой деформации ε_0 и температуры θ матрицы $[D_1]$ и $[D_2]$ имеют такую же структуру, как и в (21), но модуль Юнга и коэффициент Пуассона зависят от первого инварианта упругой деформации и температуры — $E = E(\varepsilon_0, \theta)$, $\mu = \mu(\varepsilon_0, \theta)$. В случае пластически несжимаемого материала нетрудно перейти от ε_0 к давлению $\sigma_0 \left(\sigma_0 = \frac{1}{3} K \varepsilon_0 \right)$, где K — модуль объемного сжатия и считать, что $E = E(\sigma_0, \theta)$, $\mu = \mu(\sigma_0, \theta)$.

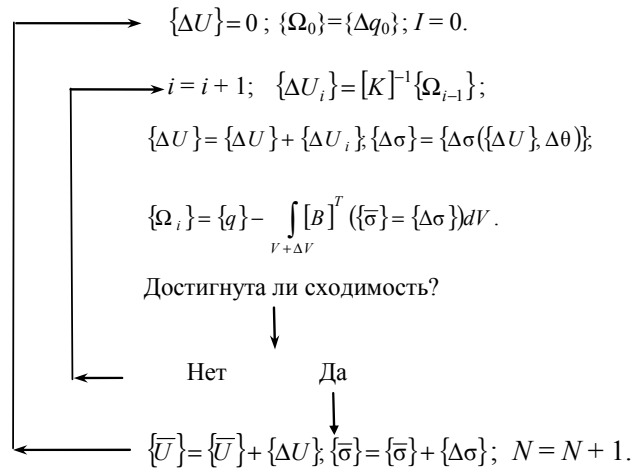
В трехмерном случае векторы $\left\{ \frac{dF}{d\sigma} \right\}$ и $\{ \Psi \}$ имеют следующий вид:

$$\left\{ \frac{dF}{d\sigma} \right\}^T = \left\{ \frac{dF}{d\sigma_{11}}, \frac{dF}{d\sigma_{22}}, \frac{dF}{d\sigma_{33}}, \frac{dF}{d\sigma_{12}}, \frac{dF}{d\sigma_{13}}, \frac{dF}{d\sigma_{23}} \right\}; \quad (31)$$

$$\{ \Psi \}^T = \{ \Psi_{11}; \Psi_{22}; \Psi_{33}; \Psi_{12}; \Psi_{13}; \Psi_{23} \}. \quad (32)$$

Перемещения, деформации, напряжения, которые удовлетворяют уравнениям (27)—(32) и граничным условиям, являются решением упруго-пластической задачи.

Алгоритм метода начальных напряжений в форме, при которой отсутствует эффект неверной разгрузки, на каждом шаге догрузки имеет такой вид:



Здесь индекс i означает номер итерации, N — номер шага нагружения; $\{ \bar{U} \}, \{ \bar{\sigma} \}$ — равновесные значения перемещений и напряжений, известные из

предыдущего шага решения (на первом шаге $\{\bar{U}\}, \{\bar{\sigma}\}$ приравнивают нулю); $[K]$ — матрица жесткости. В этом алгоритме вместо $[K]$ можно использовать любую другую матрицу, которая обеспечит наиболее быструю сходимость итерационного процесса.

Итерационный процесс заканчивается при выполнении какого-то критерия сходимости. В данной программе таким критерием является условие $\frac{\{\Omega_i\}^T \{\Omega_i\}}{\{q\}^T \{q\}} \leq \delta$, где δ — заданная точность вычислений. Отметим, что для

вычисления напряжений необходимо точно определять момент перехода деформирования из упругой области в упруго-пластическую. Это можно определить с помощью следующей процедуры. Пусть в начале итерации $F(\{\sigma\}, \theta, q) = F_1 < 0$. При решении системы уравнений по алгоритму метода начальных напряжений определяем напряжения $\{\Delta\sigma\}$ по упругому закону ($\alpha = 0$). Пусть при этом $F(\{\sigma\} + \{\Delta\sigma\}, \theta + \Delta\theta, q = F_2) > 0$. Тогда необходимо определить параметр r , который будет характеризовать выход на поверхность нагружения, т. е. $F(\{\sigma\} + \{\Delta\sigma(r\{\Delta U\}, r\Delta\theta)\}, \theta + r\Delta\theta, q) = 0$. Раскладывая в ряд Тейлора функцию F и ограничиваясь только производными первого порядка, получим $r = -\frac{F_1}{F_2 - F_1}$.

Таким образом, при деформировании на величину $r\{\Delta U\}$, $r\Delta\theta$ при вычислении $\{\Delta\sigma\}$ необходимо пользоваться соотношениями (30) при $\bar{\alpha} = 0$. При последующем деформировании на величину $(1 - r)\{\Delta U\}$, $(1 - r)\{\Delta\theta\}$ следует использовать соотношения (30) для случая $\bar{\alpha} = 1$. В упруго-пластической области ($\bar{\alpha} = 1$) при больших значениях $\{\Delta\varepsilon\}$, $\{\Delta\theta\}$ их необходимо разбить на m шагов нагружения и затем проинтегрировать (30). Число точек интегрирования можно рассчитать по формуле $m = F_2/\Delta\sigma_T$, где $\Delta\sigma_T \approx 0,1\sigma_T$ (σ_T — предел текучести).

Алгоритм моделирования процесса протекания мартенситного фазового превращения в объеме материала образца при его деформировании в ДАС

Процесс протекания фазового превращения в объеме образца рассмотрен в предположении, что фазовая деформация — чисто объемная и равна ε_0 , константа диссипации k зависит только от температуры, температура в ходе фазового превращения в элементарном объеме V_n не изменяется, в произвольный момент времени ФП может происходить только в одном конечном элементе. Таким образом, при фиксированной температуре и известных значениях k и $\Delta\psi^0$ величина интеграла работы φ (согласно критерию ФП (10)) дает полную информацию для оценки возможности ФП в данной точке материала. Поскольку заранее не известно, в какой именно точке материала образца будет происходить ФП (известно только то, что он может происходить в объеме образца), необходимо проверять всю область, занятую образцом — рассчитывать величину интеграла работы и на основании принципа максимума и критерия ФП принимать решение о возможности перехода. Таким образом, последовательность вычислительного процесса состоит в следующем:

— задание исходной информации о конечноэлементном разбиении конструкции, упруго-пластических свойств материалов, граничных условий;

— задание области, в которой возможно протекание ФП (вся область, занимаемая образцом);

— проверка всех конечных элементов (КЭ) в заданном объеме материала образца на возможность протекания ФП. Для этого предполагают, что переход происходит в одном конечном элементе области, решают упруго-пластическую задачу с заданной величиной фазовой деформации ϵ_0 в этом элементе и рассчитывают условия ФП для него (интеграл работы и движущую силу перехода). Такую процедуру повторяют для всех КЭ в заданном объеме материала образца;

— сортировка КЭ в этой области в соответствии с критерием максимума движущей силы. ФП будет происходить в элементе с максимальной движущей силой \bar{X} . Для данного КЭ задают величину ϵ_0 и повторно решают упруго-пластическую задачу, рассчитывая поля напряжений и деформаций нового двухфазного материала;

— возвращение на второй этап и повторение данной последовательности вычислений.

Данная последовательность вычислений позволяет выявить кинетику роста области ФП. Указанный алгоритм реализован в виде программ для вычислительного комплекса “Термомеханика 2”.

На рис. 2 приведена блок-схема алгоритма вычислительного процесса для моделирования кинетики протекания ФП в упруго-пластическом материале.

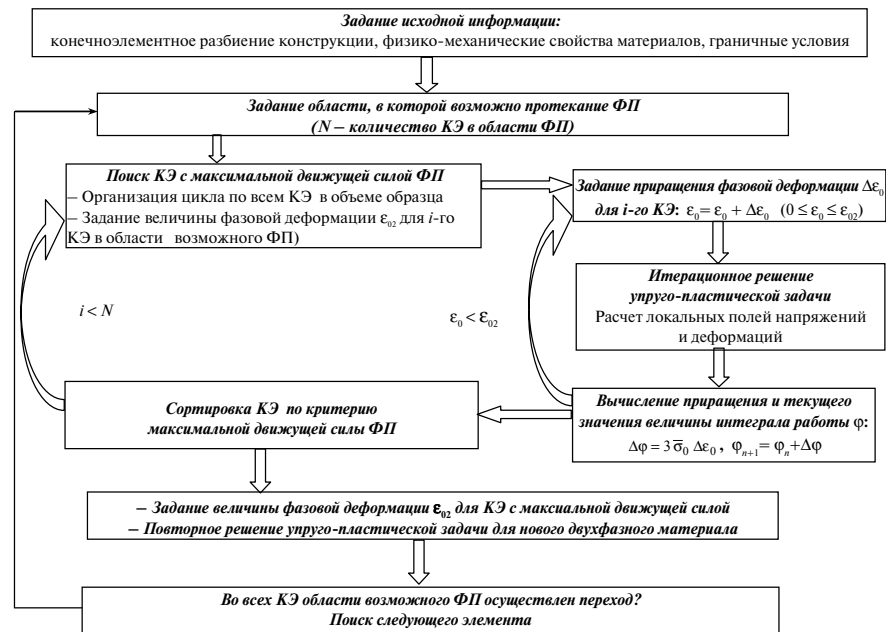


Рис. 2. Блок-схема алгоритма вычислительного процесса для моделирования кинетики протекания ФП в упруго-пластическом материале.

Оценка величины константы диссипации вследствие фазового превращения

Величина константы диссипации k , обусловленной протеканием фазового превращения, зависит от ряда причин, таких как взаимодействие фазовой де-

формации или движущихся границ с различными дефектами — примесями, вакансиями, дислокациями, зернами и т. д.; эмиссия акустических волн; циклические силы сопротивления (Peierls barrier) в кристаллах.

Величина константы k может быть различной для процессов зародышеобразования и развития границ, а также для прямого и обратного переходов и, по-видимому, должна представлять собой сложную функцию параметров процесса термомеханического деформирования и микроструктуры материала. Однако в [20, 34] показано, что она может быть описана достаточно простой формулой $k = L\sigma_T\epsilon_0$, где σ_T — предел текучести, ϵ_0 — объемная фазовая деформация, L — некоторый коэффициент.

Величина коэффициента L была определена для ряда материалов (таблица).

Величина параметра L для различных материалов [20, 34]

Материал	L
RbCl, KCl, KBr	5,89
CdS, CdSe	1,39
InSb, Bi	0,11
Графит, алмаз	~ 3
Сплав Fe + 30 % Ni	7,5

Физическая интерпретация соотношения для константы диссипации k состоит в следующем: параметр k характеризует взаимодействие движущейся поверхности раздела фаз и параметров микроструктуры материала, а предел текучести также является интегральной характеристикой микроструктуры, так как пластическое течение является движением дислокаций через такие же самые препятствия (точечные, линейные и другие дефекты). Поэтому, если предположить истинность полученного выражения в общем случае, тогда зависимость параметра k от температуры, пластической деформации, скорости пластической деформации, размеров зерен и т. п. также будет определена. При больших деформациях, согласно закономерностям, обнаруженным в [32, 33], предел текучести и, соответственно, константа K также не должны зависеть от деформации и истории деформирования.

Выводы

Разработаны методика и алгоритм численного моделирования фазовых превращений мартенситного типа в малых объемах материала образца при деформировании в квазигидростатических условиях в аппарате сверхвысокого давления с алмазными наковальнями. Методика базируется на термодинамически обоснованном критерии фазовых превращений в упруго-пластических материалах и экстремальном принципе для определения всех неизвестных параметров. Алгоритм моделирования кинетики процесса фазового превращения состоит в циклическом решении контактной упруго-пластической задачи, расчете изменения распределения локальных напряжений в зависимости от изменения фазовой деформации, вычислении движущей силы превращения, оценке возможности протекания фазового превращения и повторном решении контактной упруго-пластической задачи с заданной величиной фазовой деформации.

Разработано программное обеспечение для численного, методом конечных элементов, моделирования термомеханических процессов, протекающих

в элементах конструкций в условиях высоких давлений, больших деформаций и фазовых переходов мартенситного типа.

1. *Jayaraman A.* Diamond anvil cell and high-pressure physical investigations // *Rev. Mod. Phys.* — 1983. — **55**, N 1. — P. 65—108.
2. *Jayaraman A.* Ultrahigh pressure // *Rev. Sci. Instrum.* — 1986. — **57**, N 6. — P. 1013—1031.
3. *Sherman W. F., Stadtmuller A. A.* Experimental techniques in high pressure research. — London: John Wiley & Sons Ltd, 1987. — 471 p.
4. *Novikov N. V., Petrusha I. A., Shvedov L. K. et al.* Abrupt irreversible transformation of rhombohedral BN to a dense form in uniaxial compression of CVD material // *Diamond Relat. Mater.* — 1999. — **8**. — P. 361—363.
5. *Лившиц И. М., Гулида Л. С.* К теории локального плавления // *Докл. АН СССР.* — 1952. — **87**. — С. 377—380.
6. *Ройтбурд А. Л., Темкин Д. Е.* Пластическая деформация и термодинамический гистерезис при фазовых переходах в твердых телах // *Физика твердого тела.* — 1986. — **28**. — С. 432—436.
7. *Барьяхтар В. Г., Енилевский С. Г., Токий В. В., Яблонский Д. А.* Термодинамическая теория зародышеобразования в упругопластическом материале // *Там же.* — 1986. — **28**. — С. 1303—1310.
8. *Kaganova I. M., Roitburd A. L.* Effect of plastic deformation on the equilibrium shape of a new phase inclusion and thermodynamic hysteresis // *Sov. Phys. Solid State.* — 1989. — **31**. — P. 545—550.
9. *Ganghoffer J. F., Denis S., Gautier E. et al.* Micromechanical simulation of a martensitic transformation by finite element // *J. Phys. IV. Colloque C4, Suppl. J. Phys. III.* — 1991. — **1**. — P. 83—88.
10. *Marketz F., Fischer F. D.* A mesoscale study on the thermodynamic effect of stress on martensitic transformation // *Metallurg. Mater. Trans. A.* — 1995. — **26**. — P. 267—278.
11. *Levitas V. I.* Phase transitions in inelastic materials at finite strains: a local description // *J. Phys. IV., Colloque C1, Suppl. J. Phys. III.* — 1996. — **6**. — P. 55—64.
12. *Levitas V. I., Stein E., Idesman A. V.* Phase transitions in elastoplastic materials: thermodynamical theory and numerical simulation // *Ibid.* — 1996. — **6**. — P. 309—314.
13. *Levitas V. I., Idesman A. V., Stein E.* Finite element simulation of martensitic phase transitions in elastoplastic materials // *Int. J. Solids Struct.* — 1997. — **35**. — P. 855—887.
14. *Raniecki B., Bruhns O.* Thermodynamic reference model for elastic plastic solids undergoing phase transformations // *Arch. Mech.* — 1991. — **43**. — P. 343—376.
15. *Левитас В. И.* Термомеханика фазовых превращений и неупругие деформации в микронеоднородных материалах. — Киев: Наук. думка, 1992. — 248 с.
16. *Levitas V. I.* Thermomechanics of martensitic phase transitions in elastoplastic materials // *Mech. Res. Commun.* — 1995. — **22**. — P. 87—94.
17. *Leblond J. B., Devaux J., Devaux J. C.* Mathematical modeling of transformation plasticity in steels. Part I and II. // *Int. J. Plasticity.* — 1989. — **5**. — P. 551—591.
18. *Marketz F., Fischer F. D.* Micromechanical modelling of stress-assisted martensitic transformation // *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* — 1994. — **2**. — P. 1017—1046.
19. *Marketz F., Fischer F. D.* A micromechanical study on the coupling effect between microplastic deformation and martensitic transformation // *Comput. Mater. Sci.* — 1994. — **3**, N 2. — P. 307—325.
20. *Levitas V. I.* Thermomechanical theory of martensitic phase transformations in inelastic materials // *Int. J. Solids Struct.* — 1998. — **35**, N 9—10. — P. 889—940.
21. *Levitas V. I.* Thermomechanics and kinetics of generalized second-order phase transitions in inelastic materials. Application to ductile fracture // *Mech. Res. Commun.* — 1998. — **25**, N 4. — P. 427—436.
22. *Levitas V. I.* General thermomechanical and kinetic approach to structural changes in inelastic material // *Constitutive and Damage Modelling of Inelastic Deformation and Phase Transformation: Proc. of "Plasticity'99"*. — Maryland: Neat Press Fulton, 1998. — P. 235—238.
23. *Levitas V. I.* Structural changes without stable intermediate state in inelastic material. Part I. General thermomechanical and kinetic approaches // *Int. J. Plasticity.* — 2000. — **16**. — P. 805—849.

24. *Levitas V. I.* Structural changes without stable intermediate state in inelastic material. Part II. Applications to displacive and diffusional-displacive phase transformations, strain-induced chemical reactions and ductile fracture // *Ibid.* — 2000. — **16**. — P. 851—892.
25. *Levitas V. I.* Continuum mechanical fundamentals of mechanochemistry // *High Pressure Surface Science and Engineering. Section 3* / Eds. Y. Gogotsi, V. Domnich. — Bristol: Institute of Physics, 2004. — P. 159—292.
26. *Fu S., Huo Y., Muller I.* Thermodynamics of pseudoelasticity: an analytical approach // *Acta Mechanica*. — 1993. — **99**. — P. 1—19.
27. *Levitas V. I.* The postulate of realizability: formulation and applications to post-bifurcation behavior and phase transitions in elastoplastic materials. Part I and II // *Int. J. Eng. Sci.* — 1995. — **33**. — P. 921—971.
28. *Новиков Н. В., Левитас В. И., Полотняк С. Б.* Численное моделирование напряженно-деформированного и предельного состояния элементов аппарата высокого давления с алмазными наковальнями // *Сверхтв. материалы*. — 1987. — № 1. — С. 3—10.
29. *Idesman A. V., Levitas V. I.* Finite element procedure for solving contact thermoplastic problems at large strain, normal and high pressures // *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.* — 1995. — **126**. — P. 39—66.
30. *Левитас В. И., Полотняк С. Б., Идесман А. В.* Большие упруго-пластические деформации и напряженное состояние деформируемой прокладки аппарата высокого давления с алмазными наковальнями // *Пробл. прочности*. — 1996. — № 3. — С. 78—88.
31. *Polotnyak S. B., Idesman A. V.* Numerical modelling of the mechanical state of deformable gaskets in diamond anvil cell // *J. Mater. Proc. Technology*. — 1996. — **60**. — P. 685—690.
32. *Левитас В. И.* Большие упругопластические деформации материалов при высоком давлении. — Киев: Наук. думка, 1987. — 232 с.
33. *Levitas V. I.* Large deformation of materials with complex rheological properties at normal and high pressure. — New York: Nova Science Publishers, 1996. — 374 p.
34. *Levitas V. I.* Phase transitions in elastoplastic materials: continuum thermomechanical theory and examples of control. Part II // *J. Mech. Phys. Solids*. — 1997. — **40**, N 7. — P. 1203—1222.

Ин-т сверхтвердых материалов
им. В. Н. Бакуля НАН Украины

Поступила 01.10.07