

# Моделирование процессов деформации трехмерных структурно-неоднородных материалов\*

В.А. РОМАНОВА, Р.Р. БАЛОХОНОВ, Р.А. БАКЕЕВ, О.С. ЕМЕЛЬЯНОВА, Н.И. КАРПЕНКО  
*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*  
e-mail: varvara@ispms.tsc.ru

В настоящей работе представлен подход к моделированию механического поведения неоднородных материалов с явным учетом трехмерной структуры. Для генерации 3D-структур различного типа предлагается метод пошагового заполнения. Для каждой микроструктурной фазы задаются соответствующие определяющие соотношения, и построенная микроструктурная модель вводится в общую систему уравнений. Трехмерная задача решается численно методами конечных элементов или конечных разностей. Особое внимание при анализе численных результатов уделяется явлениям мезоуровня, таким как локализация деформации и концентрация напряжений вблизи границ раздела, зарождение пластических сдвигов, формирование деформационного рельефа и т.д. В качестве иллюстрации приведены численные результаты, полученные для поликристаллических и композиционных материалов.

**Введение.** Теоретические и экспериментальные исследования многоуровневых явлений деформации и разрушения приобретают особое значение для прогнозирования поведения нагруженных материалов, поскольку накопление необратимых деформаций и повреждений на более мелких масштабах может привести к макроскопическому разрушению конструкции.

Одним из возможных подходов к многоуровневому моделированию является учет в моделях внутренней структуры материала в явном виде, через зависимость физико-механических свойств (плотности, предела текучести, модулей упругости и др.) от координат. В трехмерном случае процедура явного учета неоднородностей предполагает наличие информации о структурном строении каждого слоя образца. Экспериментальные методы, позволяющие получить серию послойных изображений реальных структур, достаточно сложны и дорогостоящи. Альтернативой является моделирование трехмерных структур, близких к реальным по геометрическим характеристикам.

В [1] был предложен метод генерации трехмерных структур, основанный на пошаговом заполнении дискретизированного объема структурными элементами в соответствии с определенными геометрическими законами. В ряде последующих работ (см. например, [2]) с помощью этого метода были сгенерированы структуры различных материалов, включая поликристаллические металлы, двухфазные композиты с различной геометрией включений, пористые керамики, уголь, микроструктуры сварных соединений и др. и проведены трехмерные расчеты поведения этих материалов в условиях квазистатического и динамического нагружения. В настоящей работе представлен обзор результатов трехмерного моделирования. Основное внимание

---

\*Работа поддержана грантами Президента РФ (МД-6370.2010.1, МД-202.2011.8) и РФФИ (10-08-00084-а).

уделяется анализу роли свободной поверхности и внутренних границ раздела в развитии деформационных процессов на мезоуровне.

**Особенности трехмерного численного анализа.** Процедура трехмерного численного анализа поведения материала со структурой включает а) разработку трехмерной модели материала с учетом микроструктурных особенностей и механического отклика отдельных компонент, б) задание начальных и граничных условий, в) численное решение задачи в динамической или квазистатической постановке и г) анализ эволюции напряженно-деформированного состояния на мезо- и макроуровнях.

Построение модели материала предполагает определение в явном виде зависимости физико-механических свойств от координат (генерацию микроструктуры) и задание определяющих соотношений для каждой фазы микроструктуры. На уровне численной реализации в точках дискретизированной расчетной области, принадлежащих различным структурным элементам, задаются соответствующие физико-механические свойства. Дискретизация расчетной сеткой осуществляется таким образом, чтобы поверхности раздела совпадали с узлами расчетной сетки. Тогда уравнения континуальной механики могут применяться таким же образом, как и для однородной среды, но определяющие соотношения и/или механические свойства по разные стороны от границы раздела будут различными. Между соседними фазами предполагается наличие идеального механического контакта.

В работах [1, 2] для генерации структур различного типа была применена процедура пошагового заполнения дискретного пространства объемными структурными элементами (*step-by-step packing (SSP)*). В общем случае SSP-процедура генерации трехмерной структуры включает следующие шаги. В пределах дискретизированного расчетного объема задаются центры зарождения новых фаз – расчетные ячейки с ненулевыми структурными индексами. Закон распределения центров зарождения по объему может быть задан на основе анализа экспериментальных данных. Например, для моделирования поликристаллической структуры конкретного сплава закон распределения зародышей может быть извлечен из экспериментальных данных по распределению примесей в расплаве, которые могут служить центрами кристаллизации. Далее проводится заполнение объема структурными элементами в соответствии с заданными геометрическими законами. Для этого на каждом шаге заполнения задается приращение объема структурных элементов. Величина приращения контролирует скорость роста новой фазы, а закон роста определяет ее форму. Данная процедура выполняется до тех пор, пока объемная доля структуры не достигнет заданного значения. В случае 100% заполнения критерием окончания процедуры будет отсутствие точек с нулевым индексом. В качестве иллюстрации на рис. 1 приведены микроструктуры различных материалов, сгенерированные SSP-методом.

Построение модели материала завершает определение механического отклика составляющих компонент. Затем построенные микроструктурные модели материалов и определяющие соотношения вводятся в общую систему уравнений континуальной механики, включающую в динамической постановке законы сохранения массы, импульса и энергии. Система уравнений, дополненная начальными и граничными условиями, решается численно методом конечных элементов или методом конечных разностей.

Для задач механики сред со структурой особое значение приобретает применение

методов параллельного вычисления, поскольку такие задачи предъявляют повышенные требования к объему оперативной памяти и быстродействию вычислительной техники. С одной стороны, для корректной аппроксимации геометрически неровных границ раздела необходимы расчетные сетки с высоким разрешением. С другой стороны, для воспроизведения макроскопического отклика необходимо рассматривать представительные объемы материала с большим количеством структурных элементов в расчетной области. Существенное преимущество с точки зрения параллельных вычислений имеют явные конечно-разностные схемы, применяющиеся для решения динамических задач. Поэтому в настоящей работе задача решалась в динамической постановке, несмотря на то, что предметом анализа являлись квазистатические процессы. Было показано, что решение задач квазистатики в динамической постановке возможно при условии, что материал является нечувствительным к скорости нагружения в диапазоне квазистатических нагрузок и скорость нагружения наращивается достаточно плавно, чтобы минимизировать волновые эффекты. Распараллеливание вычислительного процесса проводилось по пространству. В этом случае зависимость времени вычислений от количества слоев расчетной сетки, приходящихся на каждый вычислительный процесс, является практически линейной. Расчеты проводились на многопроцессорном кластере "СКИФ" Томского государственного университета.

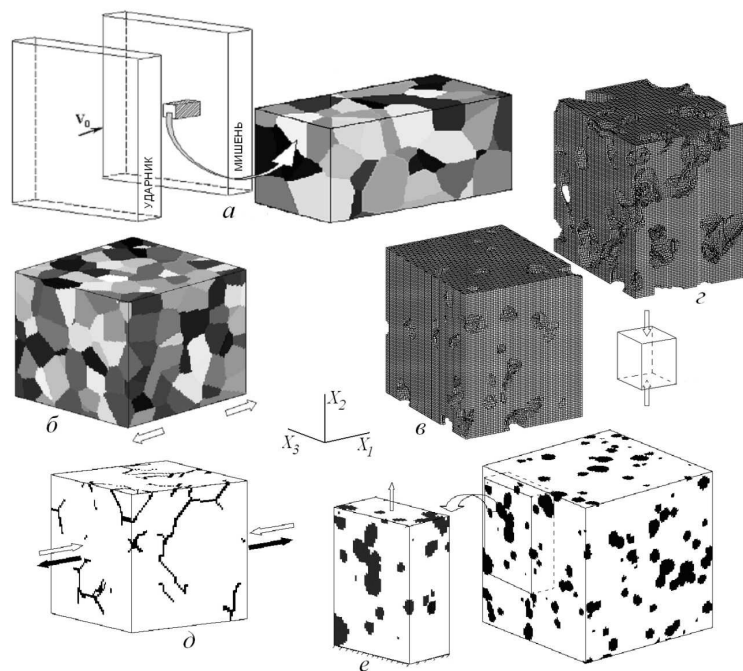


Рис. 1. Модели трехмерных структур и схемы их нагружения: а, б – поликристаллические структуры; в, г – керамики с пористостью 12 и 40 %, д – уголь с изначально присутствующими трещинами; е – композит  $Al/Al_2O_3$ .

**Результаты моделирования.** На основе вышеизложенного подхода были проведены численные исследования процессов деформации и разрушения в различных материалах, включая поликристаллические стали и алюминиевые сплавы, металлокерамические и угольные композиты, керамики с различной степенью пористости, материалы с покрытиями и сварные соединения. Несмотря на существенное

различие свойств и внутренней структуры исследованных материалов, можно сделать некоторые общие выводы относительно роли свободной поверхности и внутренних границ раздела в процессах деформации и разрушения на мезо- и макроуровнях.

С самого начала нагружения границы раздела являются источниками концентрации напряжений, в результате чего зарождение пластических сдвигов на мезоуровне происходит при макроскопических напряжениях существенно ниже предела упругости. Величина напряжений в областях концентрации тем больше, чем больше разница упругих модулей контактирующих материалов и кривизна границ раздела. В объеме поликристаллических структур наибольший уровень напряжений наблюдается вблизи тройных стыков зерен, а в композиционных материалах – вблизи границ раздела, характеризующихся наибольшей кривизной.

Наиболее мощным концентратором напряжений является поверхность образца, поскольку она служит границей раздела между материалами с наиболее отличными механическими свойствами (твердым телом и воздухом). К тому же, даже изначально плоская поверхность приобретает геометрическую кривизну на мезо- и макроуровнях в процессе нагружения. Расчеты, проведенные для поликристаллических образцов, показали, что локальные напряжения и деформации на свободной поверхности существенно превышают соответствующие характеристики в объеме образца. На рис. 2 в качестве иллюстрации приведены картины интенсивностей напряжений и пластических деформаций на поверхности и в среднем сечении поликристалла. Высокий уровень локальных напряжений вблизи границ зерен, выходящих на поверхность, является причиной зарождения первых пластических сдвигов в этих областях.

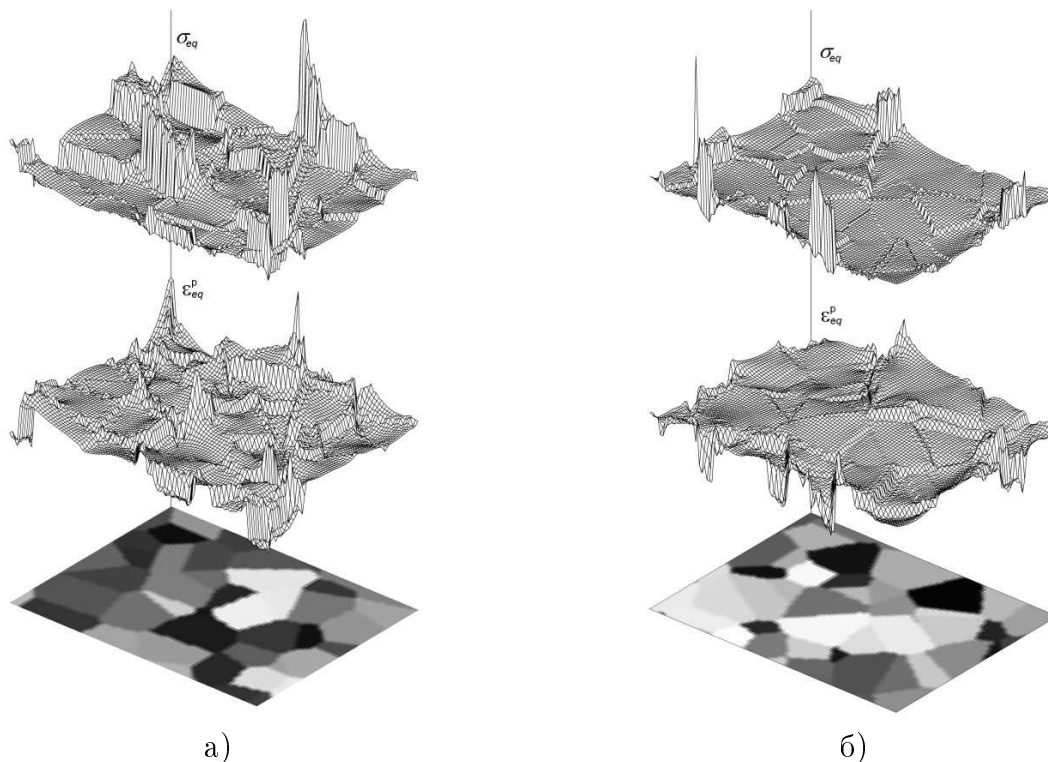


Рис. 2. Интенсивности напряжений и пластических деформаций на поверхности (а) и в среднем сечении (б) поликристалла Al1100 при растяжении до 0.5%.

Неоднородность внутренней структуры является причиной формирования деформационного рельефа на свободной поверхности материалов. Изначально плоская свободная поверхность испытывает морфологические изменения с самого начала нагружения. В качестве примера на рис. 3в приведен деформационный рельеф, сформировавшийся на поверхности поликристаллического образца на упругой стадии растяжения. Ширина сформировавшихся складок в несколько раз превышает характерный размер зерен. Было получено, что в процессе нагружения амплитуда рельефных складок растет, однако качественно картина не меняется, пока не происходит смены механизмов деформации (например, упруго-пластический переход). Влияние внутренних границ раздела на картину деформационного рельефа нелинейно ослабевает с удалением от свободной поверхности.

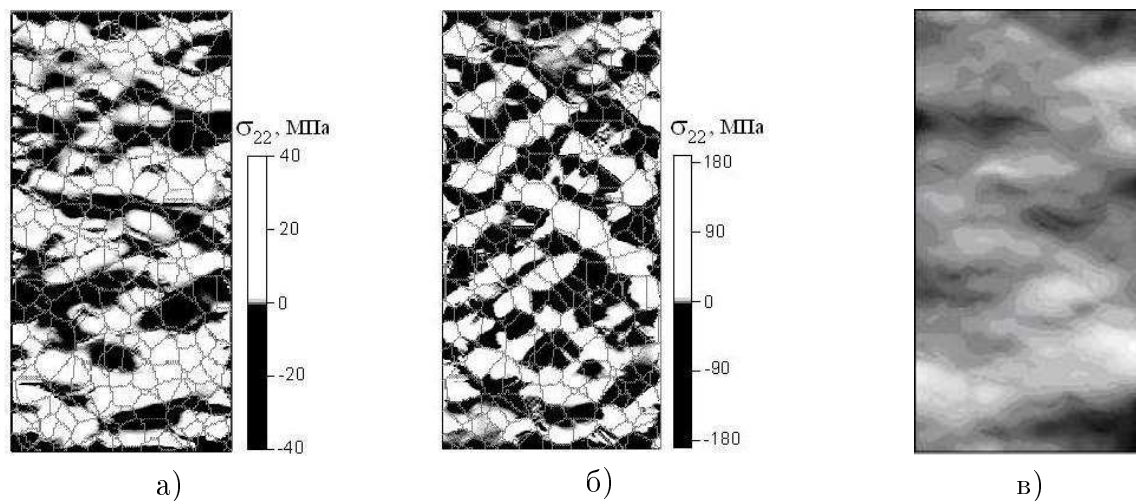


Рис. 3. а, б – распределения напряжений, действующих перпендикулярно свободной поверхности, на глубине 50 мкм; в – рельеф на свободной поверхности;  $\varepsilon=0.1\%$ (а, в) и  $1.1\%$ (б).

При любых условиях макроскопического нагружения наличие внутренних границ раздела является причиной сложного напряженно-деформированного состояния на мезоуровне. Независимо от вида макроскопического напряженного состояния все компоненты тензоров напряжений и деформаций в локальных областях вблизи границ раздела отличны от нуля и вносят соизмеримый вклад в мезоскопический отклик материала. В качестве примера на рис. 4 приведены частотные распределения компонент тензоров напряжений в металлокерамическом композите (рис. 1е) и поликристаллическом алюминиевом образце (рис.1б), находящихся в условиях одноосного растяжения. Очевидно, что наибольший вклад в напряженное состояние вносит напряжение, действующее в направлении растяжения. Суммарные значения остальных компонент тензора напряжений должны быть равны нулю, для того чтобы обеспечить макроскопическое равновесие образца. Действительно, частотные распределения компонент напряжений, действующих перпендикулярно оси растяжения, демонстрируют симметричный разброс относительно нуля (см. рис. 4), что в сумме обеспечивает отсутствие макроскопических напряжений. Вместе с тем отклонение от нулевого уровня свидетельствует о том, что в процессе растяжения в локальных областях материала возникают напряжения, действующие в направлении перпендикулярном оси растяжения. Расположенные периодически области положительных и отрицательных значений напряжений взаимокompенсируют

друг друга, обеспечивая, таким образом, выполнение условий макроскопического равновесия.

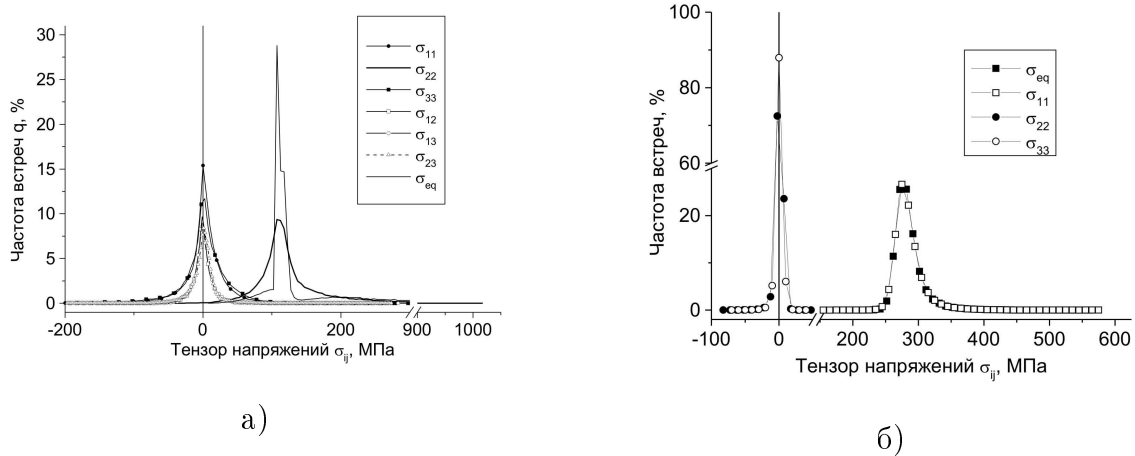


Рис. 4. Частотные распределения компонент тензоров напряжений в трехмерном металлокерамическом композите  $Al/Al_2O_3$  (а) и поликристаллическом алюминии (б) в условиях одноосного растяжения до 0.5 (а) и 0.1% (б).

На поверхности ненулевые значения нормальных напряжений наблюдаются вдоль границ зерен и упрочняющих включений. Однако в приповерхностном слое уже на расстоянии примерно половины среднего диаметра зерна ненулевые напряжения, действующие перпендикулярно свободной поверхности, образуют широкие протяженные области (рис. 3а,б). Интересно отметить, что на упругой стадии нагружения области положительных и отрицательных напряжений ориентированы перпендикулярно оси нагружения (рис. 3а). Эта картина качественно меняется на стадии развитого пластического течения (рис. 3б) – области растягивающих и сжимающих напряжений переориентируются под углом примерно 45 градусов к оси растяжения, что соответствует наклону площадок макроскопических максимальных касательных напряжений. Аналогичные выводы справедливы в отношении компонент тензора деформаций.

На примере трехмерных расчетов разрушения керамических включений и угольного композита было получено, что все трещины на мезоуровне как при растяжении, так и при сжатии зарождаются и распространяются в областях объемного растяжения. Эти результаты подтверждают выводы экспериментальных и теоретических работ, в которых показано, что на мезоуровне вблизи границ раздела присутствуют области объемного растяжения и именно в этих областях происходит зарождение трещин.

## Список литературы

- [1] Романова В.А., Балохонов Р.Р., Карпенко Н.И. Моделирование механического поведения материалов с учетом трехмерной внутренней структуры // Физическая мезомеханика. - 2004. - Т. 7. - №2. - С. 71-79.
- [2] Поверхностные слои и внутренние границы раздела в гетерогенных материалах: под ред. В.Е.Панина, Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2006, 520 с.