МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕФОРМАЦИОННОЙ МИКРОТЕКСТУРЫ ПОЛИКРИСТАЛЛА

Виколайнен В.Э., Ермакова Н.Ю. (Санкт-Петербургский государственный политехнический университет)

Прочностные свойства элементов конструкций во многом определяются текстурой, формирующейся при пластической деформации. Большинство моделей, используемых для моделирования эволюции текстуры поликристалла, не учитывают взаимодействия кристаллитов, что приводит к ошибочным предсказаниям локальной текстуры [1]. В настоящей работе используется модель расчета разориентаций отдельных зерен в ГЦК-поликристалле в процессе пластической деформации.

Модельный поликристаллический агрегат состоит из одинаковых полиэдров. Каждый кристаллит имеет 14 непосредственных соседей: восемь из них являются ближайшими, граничащими по фасеткам в форме правильного шестиугольника, а шесть примыкают к граням квадратной формы. Зерна, будучи представлены таким образом, при объединении их в агрегат обеспечивают плотную, без несплошностей, упаковку (рис.1,а). Под действием деформации и весь поликристалл, и составляющие его зерна будут изменять свою форму, характер этого изменения определяется типом пластического воздействия. На рис. 1,6 схематически представлен деформированный сжатием поликристаллический агрегат.



Рис.1. Фрагмент модельного поликристалла в исходном состоянии (а) и после деформации сжатием (б).

На начальной итерации (k=1) первого и последующих шагов нагружения осуществляется выбор основной системы скольжения в каждом (n-ом) из зерен агрегата. Это система, характеризуемая наибольшим напряжением сдвига под действием внешнего поля напряжений. В геометрическом смысле она ориентирована наиболее благоприятно относительно приложенной к кристаллиту скорости макроскопической деформации D^{M} :

 $\mathbf{d}_1^n : \mathbf{D}^M = \max; \qquad \mathbf{d}_1^n = \operatorname{Sym}(\mathbf{b} \otimes \mathbf{m}).$ (1)

В этом выражении d_1^n - направляющий тензор системы скольжения, m - единичная нормаль к плоскости скольжения, и единичный вектор b - направление скольжения; : и \otimes обозначают, соответственно, внутреннее произведение двух тензоров (свертку) и диадное произведение двух векторов. Соответствующая скорость сдвига γ_1^n находится из условия минимизации отклонения скорости деформации n-ого Dⁿ зерна от D^M:

$$\mathbf{D}_1^n: \Delta_1^n = \min. \qquad \mathbf{D}_1^n = D^M - \gamma_1^n \cdot d_1^n.$$
(2)

При выборе следующей k-ой системы скольжения в n-ом зерне ($k \ge 2$) сначала вычисляется среднее значение скорости деформации в зернах, окружающих данное. Относительный вклад в среднее \mathbf{D}^{Cn} от каждого соседнего i-ого зерна пропорционален площади контактной фасетки S_i :

$$\mathbf{D}_{k-1}^{Cn} = \frac{1}{S_{\Sigma}} \sum_{i=1}^{N} S_i \cdot \mathbf{D}_{k-1}^i, \qquad S_{\Sigma} = \sum_{i=1}^{14} S_i.$$
(3)

Реализованный в данной модели учет формоизменения состоит в том, что на каждом шаге деформирования определяется новое положение координат вершин полиэдра, и, соответственно, относительный вклад в среднюю скорость деформации окружающих зерен также изменяется по мере нагружения.

Несоответствие в скоростях деформации кристаллита и его окружения, имеющееся к моменту выбора k-ой системы скольжения, вычисляется:

$$\mathbf{D}_{k-1}^{n} = D_{k-1}^{Cn} - \gamma_{1}^{n} \cdot D_{1}^{n} - \mathbf{K} - \gamma_{k-1}^{n} \cdot D_{k-1}^{n}.$$
(4)

В качестве следующей, k-ой, системы скольжения, с одной стороны, следует выбирать ту, которая обеспечивает наилучшую аккомодацию \mathbf{D}_{k-1}^{n} ; с другой стороны, она не должна сильно отличаться от скорости макродеформации. В результате направляющий тензор \mathbf{d}_{k}^{n} искомой системы скольжения должен иметь промежуточное между \mathbf{D}_{k-1}^{n} и \mathbf{D}^{M} направление. Из соображений удобства эти два тензора учитываются с равным весом:

$$d_k^n: \left(D^M + \mathbf{D}_{k-1}^n\right) = \max.$$
⁽⁵⁾

После выбора k-ой системы скольжения происходит перераспределение скоростей сдвига в избранных ранее системах, поэтому из условия минимума отклонения в скоростях деформации зерна и его окружения (||Δ||)вычисляются новые значения скоростей сдвигов:

$$\left\|\Delta\right\| = \mathbf{d}_{k}^{n} \cdot \mathbf{d}_{k}^{n} = \min, \qquad \mathbf{d}_{k}^{n} = D_{k-1}^{Cn} - \gamma_{1}^{n} \cdot d_{1}^{n} - \mathbf{K} - \gamma_{k}^{n} \cdot d_{k}^{n}.$$
(6)

Последовательное выполнение итераций можно проводить до тех пор, пока невязка скоростей деформации не достигнет заданного уровня. В настоящей работе процедура выбора активных систем скольжения прерывалась на пятой итерации, чтобы избежать проблемы определения уровня межзеренной аккомодации. Пять действующих систем могут обеспечить любую деформацию, поэтому на момент завершения итерационной процедуры в каждом зерне обеспечивается условие $\|\mathbf{D}\| = 0$.

Произведенные в соответствии с изложенным алгоритмом расчеты показывают, что, хотя и выполняется условие минимальной несовместности между зерном и его окружением на каждой итерации, наблюдается отставание скорости деформации кристаллита от макроскопической величины \mathbf{D}^{M} . Проявляется это обстоятельство после вычисления скоростей сдвига и нахождения скоростей деформации во всех зернах. Для разрешения этой проблемы проводится масштабирование, которое заключается в том, что деформация каждого кристаллита \mathbf{D}_{5}^{n} рассчитывается с учетом поправочного множителя $\|\mathbf{D}^{M}\|/\|\langle \mathbf{D}_{5}^{n}\rangle\|$, где $\langle \mathbf{D}_{5}^{n}\rangle$ - средняя по всему поли-

кристаллическому агрегату скорость деформации после пятой, заключительной, итерации.

При математическом описании множественного скольжения изложенным образом возникают различия в скоростях деформации между зернами поликристалла, тем самым оказывается выполненным условие наилучшей пластической аккомодации зерна с окружением без использования допущения Тейлора о деформационной однородности всех зерен поликристалла.

На каждом шаге деформации для всех зерен определяются скорости деформации и скорости сдвига по действующим системам скольжения γ_k^n (k = 1, K, 5). Через скорости сдвига пластический поворот зерна выражается с помощью вектора \mathbf{w}_p^n , определяемого соотношением:

$$\mathbf{w}_{p}^{n} = \sum_{j} \gamma_{j}^{n} \left(\mathbf{m} \times \mathbf{b} \right).$$
⁽⁷⁾

Предполагается что поворот кристаллической решетки \mathbf{w}_{L}^{n} аккомодирует отклонение пластического поворота \mathbf{w}_{p}^{n} от локального материального поворота (спина) \mathbf{w}^{n} зерна:

$$\mathbf{w}_{\mathrm{L}}^{\mathrm{n}} = \mathbf{w}^{\mathrm{n}} - \mathbf{w}_{\mathrm{p}}^{\mathrm{n}}. \tag{8}$$

Тогда для вычисления поворота кристаллической решетки надо вычислить спин, который, при неоднородной деформации определяется выражением [5]:

$$\mathbf{w}^{n} = \mathbf{w}^{M} - \left\langle \mathbf{N} \times [\mathbf{D}] \cdot \mathbf{N} \right\rangle_{\mathbf{S}},\tag{9}$$

где \mathbf{w}^{M} - макроскопический спин (обычно равный нулю), усреднение проводится по всем фасеткам зерна, внешние нормали к которым – N; a [D] – невязка скоростей пластической деформации на этих фасетках.



На рис.2 приведены траектории возможных переориентаций зерен с исходными ориентировками А и В в зависимости от локального окружения. Хорошо заметно, особенно для зерен с начальной ориентировкой В, что изменение ориентации оси сжатия происходит по весьма различающимся траекториям.

Рис.2. Результаты вычислений на основе предлагаемой модели для зерен с исходно одинаковыми ориентировками в условиях различного окружения

Это убеждает в том, что не только исходная ориентировка зерна, но и особенности его локального окружения существенно влияют на эволюцию текстуры. Предлагаемая модель автоматически учитывает этот фактор, воспроизводя механизм множественного скольжения с учетом аккомодации зерна с его окружением.

Литература:

1. Becker R., Panchanadeeswaram S. Effects of gran interactions on deformation and local textures in polycrystals// Acta Metall. Mater. 1995. Vol.43. P. 2701-2719.

2. Золоторевский Н.Ю., Титовец Ю.Ф., Ермакова Н.Ю. Эволюция микроструктуры в отдельных зернах поликристалла алюминия при сжатии// Физика металлов и металловедение. 2002. Т. 93, №1. С. 94-101.

ОСОБЕННОСТИ НАКОПЛЕНИЯ ПОВРЕЖДЕНИЙ ПОЛЗУЧЕСТИ В ОСОБО ТЕПЛОНАПРЯЖЕННЫХ ЗОНАХ ПОРШНЕЙ ДВС

Пылев В.А., Белогуб А.В., Турчин В.Т., Матвеенко В.В. (Национальный технический университет "Харьковский политехнический институт)

Наряду с постоянным улучшением эколого-экономических показателей двигателей внутреннего сгорания (ДВС), их развитие характеризуются неуклонным увеличением удельной мощности, надежности, ресурса. При этом значительно увеличивается термомеханическая напряженность деталей камеры сгорания (КС). С учетом объективных тенденций сокращения сроков проектирования и доводки двигателей, связанных со снижением затрат на все этапы жизненного цикла ДВС, предшествующих эксплуатации, существенно обостряется внимание к используемым методам математического моделирования и анализа исследуемых процессов. При этом актуальной проблемой становится переход от концепции обеспечения гарантированной ресурсной прочности деталей к концепции обеспечения гранично возможных показателей их термомеханической напряженности.

Оценку ресурсной прочности деталей КС в зонах локальных экстремумов напряженности выполняют на основе учета совместного накопления повреждений материала, вызванных усталостью и ползучестью, для чего может быть использовано выражение:

$$d_{fs} = \sum_{k} \frac{1}{N_{fk}} + \frac{1}{U^*} \sum_{k} U_k = 1,$$

где k – совокупность всех циклов низкочастотного нагружения детали до наступления предельного состояния материала $d_{fs} = 1$; N_{fk} – количество циклов до разрушения, вызванных усталостью в условиях единичного k-го цикла нагружения; U_k – энергия рассеивания при ползучести, вызванная единичным k-ым циклом нагружения; U^* – критическая величина энергии рассеивания при ползучести.

Здесь величины N_{fk} и U_k устанавливают, соответственно, используя уравнение Поспишила и теорию упрочнения при ползучести.

В работе [1] было показано, что с ростом уровня форсирования двигателя процесс ползучести в особо теплонапряженной зоне поршня ДВС может характеризоваться тремя выраженными зонами. Это практическое отсутствие ползучести, установившееся развитие ползучести и интенсивное ее развитие. При этом можно полагать, что переход к концепции обеспечения граничной напряженности детали КС равносилен ее работе на границе второй и третьей указанных зон. В связи с указанным возникает задача изучения особенностей протекания процесса ползучести при циклическом низкочастотном термонагружении деталей КС и, в частности, поршня.

При решении поставленной задачи исследовался процесс накопления энергии рассеивания при ползучести для поршней автомобильного бензинового двигателя 4Ч7,2/7,35 при его форсировании до 35,6 кВт/л и автотракторного дизеля 4ЧН12/14 при форсировании последнего до 18,5, 25 и 30 кВт/л. Соответственно, в качестве рассматриваемого цикла нагружения поршня принимался наиболее тяжелый переходный процесс, отвечающий модели эксплуатации двигателя легкового автомо-