

На правах рукописи

Семенов Михаил Евгеньевич

**МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ И КОМПЛЕКС ПРОГРАММ ДЛЯ
ИССЛЕДОВАНИЯ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ СКОЛЬЖЕНИЯ В
МАТЕРИАЛАХ С ГРАНЕЦЕНТРИРОВАННОЙ КУБИЧЕСКОЙ
СТРУКТУРОЙ**

Специальность 05.13.18 — Математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

Автореферат
диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Томск 2005

Работа выполнена в Томском государственном
архитектурно-строительном университете

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,
доцент Колупаева Светлана Николаевна

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,
профессор Кистенев Юрий Владимирович
доктор физико-математических наук
Князева Анна Георгиевна

Ведущая организация: Томский политехнический университет

Защита состоится 26 января 2006 года в 10 часов 30 мин. на заседании диссертационного совета Д 212.267.08 при Томском государственном университете по адресу: 634050, г. Томск, пр. Ленина, 36.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке Томского государственного университета

Автореферат разослан декабря 2005 г.

Ученый секретарь диссертационного совета
доктор технических наук, доцент

Скворцов А.В.

Общая характеристика работы

Актуальность темы. Пластическое поведение и свойства кристаллических материалов существенно определяются совместным, как правило, нелинейным влиянием текущего дефектного состояния, типа и параметров деформирующего воздействия, характеристик материала и упрочняющих фаз. Для исследования закономерностей пластической деформации в широком спектре характеристик материалов и параметров приложенного воздействия одним из наиболее перспективных подходов является математическое моделирование с учетом механизмов и процессов, определяющих основные явления пластичности. Одним из основных явлений пластической деформации (в широком спектре условий и доминирующим), обеспечивающих макроскопическое формоизменение материалов, является кристаллографическое скольжение. Процессы пластичности скольжения обусловлены, главным образом, образованием, движением, взаимодействием и аннигиляцией дефектов, прежде всего дислокаций и точечных дефектов, поэтому весьма эффективно при описании закономерностей пластической деформации скольжения использование математических моделей, основу которых составляют обыкновенные дифференциальные уравнения (ОДУ) баланса деформационных дефектов (Н.С. Акулов, Дж. Гилмен, Р. Лагнеборг, Б.А. Гринберг, Ш.Х. Ханнанов, Дж. Бергстрём, В. Эссман и Х. Муграби, Л.Е. Попов, В.С. Кобытев, С.Н. Колупаева, В.А. Старенченко, Т.А. Ковалевская и др.). Работа с такими моделями осложняется тем, что системы ОДУ в них входящие, являются, как правило, жесткими, а их решение – весьма нетривиальной задачей. Актуальность автоматизации вычислений при исследовании закономерностей пластической деформации при современном уровне развития вычислительной техники несомненна.

В настоящее время существует ряд мощных математических пакетов программ широкого назначения (MAPLE, MATLAB), позволяющих решать системы ОДУ. Для проведения исследования процессов пластической деформации с использованием математических пакетов пользователь должен иметь достаточное представление о методах решения ОДУ, навыки работы с программой и, как правило, программирования на внутреннем языке пакета. Создание комплекса программ с развитым интерфейсом пользователя, реализующих математические модели пластической деформации для различных материалов и воздействий, позволяет проводить исследования пользователю, не имеющему опыта программирования и работы с численными методами решения ОДУ.

Целью диссертационной работы является модификация математических моделей пластической деформации скольжения для ГЦК металлов и дисперсно-упрочненных сплавов и создание специализированного комплекса программ с развитым интерфейсом, предназначенного для исследования закономерностей пластической деформации и эволюции дефектной среды в условиях деформации с постоянной скоростью деформирования, постоянного напряжения и постоянной нагрузки при растяжении и сжатии.

Для достижения поставленной цели необходимо решить **следующие задачи**:

1. На основе анализа моделей пластической деформации, а также частных моделей процессов генерации и аннигиляции деформационных дефектов выбрать структуру математических моделей пластической деформации скольжения для

металлов с гранцентрированной кубической (ГЦК) структурой и дисперсно-упрочненных сплавов на их основе. Модифицировать математические модели пластической деформации скольжения в ГЦК металлах и дисперсно-упрочненных материалах с некогерентной упрочняющей фазой на основе единых предположений с учетом основных деформационных дефектов, образующихся в процессе кристаллографического скольжения, механизмов их генерации, аннигиляции и релаксационной трансформации.

2. Выбрать численный метод интегрирования жестких систем ОДУ, к которым относятся математические модели пластической деформации скольжения, основанные на системах уравнений баланса деформационных дефектов.

3. Разработать алгоритмы реализации численного метода с учетом особенностей физической системы и провести их тестирование.

4. Разработать комплекс программ, реализующий разработанные модели, с возможностью формирования модели (выбора учитываемых деформационных дефектов, механизмов их генерации и аннигиляции) в интерактивном режиме и провести его тестирование.

5. С использованием комплекса программ провести исследование влияния различных характеристик материала, упрочняющей фазы, деформирующего воздействия и исходного дефектного состояния на закономерности деформационного упрочнения и развития деформационной дефектной подсистемы в ГЦК металлах и дисперсно-упрочненных материалах с некогерентной второй фазой для различных воздействий. Рассчитать латентную энергию пластической деформации ГЦК металлов и дисперсно-упрочненных материалов с некогерентной второй фазой.

В качестве материалов для исследования закономерностей пластической деформации скольжения в работе выбраны ориентированные для множественного скольжения монокристаллы ГЦК металлов и дисперсно-упрочненных материалов с ГЦК матрицей и некогерентными недеформируемыми частицами второй фазы.

Научная новизна. Сформирована база частных моделей генерации, аннигиляции и релаксационной трансформации деформационных дефектов, сформулированных на основе единых предположений, и записаны базовые модели пластической деформации скольжения в ГЦК металлах и дисперсно-упрочненных материалах на их основе, включающие наиболее полный набор деформационных дефектов (сдвигообразующие дислокации, дислокации в дипольных конфигурациях вакансионного и межузельного типа, дислокационные призматические петли вакансионного и межузельного типа, межузельные атомы, моно- и бивакансии), механизмов их образования, аннигиляции и релаксационной трансформации.

Разработан алгоритм решения жесткой системы ОДУ модели, учитывающий физические особенности исследуемых процессов (включение/отключение процессов при достижении некоторых физических условий, неотрицательность переменных модели). Впервые разработан специализированный комплекс программ SPFCC, позволяющий автоматизировать исследование закономерностей пластической деформации скольжения в широком спектре условий. Комплекс программ обеспечивает возможность в интерактивном режиме выбирать учитываемые де-

формационные дефекты и механизмы их генерации и аннигиляции (формировать модель).

Теоретическая и практическая значимость работы. Записанные в работе базовые математические модели для ГЦК металлов и дисперсно-упрочненных материалов с некогерентными частицами позволяют проводить исследования процессов пластической деформации скольжения при различных приложенных воздействиях для широкого спектра характеристик материала и приложенного воздействия. С использованием разработанного комплекса прикладных программ проведено исследование закономерностей деформационного упрочнения, эволюции дефектной подсистемы и латентной энергии пластической деформации для меди, никеля и алюминия и дисперсно-упрочненных сплавов на их основе. Полученные результаты компьютерного моделирования для деформации с постоянной скоростью деформирования, при постоянном напряжении и постоянной нагрузке в условиях растяжения и сжатия согласуются с экспериментальными данными.

Структура комплекса программ предусматривает возможность расширения альтернативными методами решения систем ОДУ, моделями пластической деформации для других материалов либо других приложенных воздействий.

Полученные в работе результаты могут быть использованы для целенаправленного планирования экспериментов по исследованию закономерностей пластической деформации. Разработанные модели и комплекс прикладных программ могут быть использованы для комплексных расчетов совместно с моделями механики и моделями технологических процессов обработки материалов. Вычислительный модуль комплекса программ может быть использован для решения жестких систем ОДУ в различных предметных областях.

По результатам работы на защиту выносятся:

1. Математическая модель пластической деформации скольжения в монокристаллах металлов с ГЦК структурой, включающая уравнения баланса сдвигообразующих дислокаций, дислокаций в дипольных конфигурациях вакансионного и межузельного типа, межузельных атомов, моно- и бивакансий и основные механизмы их генерации, аннигиляции и релаксационной трансформации, учитывающая полный набор взаимодействий между точечными дефектами.

2. Алгоритмы численного метода интегрирования жесткой системы ОДУ модели пластической деформации скольжения, учитывающие физические особенности процесса.

3. Структура комплекса прикладных программ, обеспечивающая простоту сопровождения, модификации и расширения добавлением деформирующих воздействий и математических моделей материалов различного типа.

4. Комплекс программ SPFCC для моделирования закономерностей пластической деформации скольжения для ГЦК металлов и дисперсно-упрочненных материалов в условиях деформации с постоянной скоростью деформирования, при постоянном напряжении и постоянной нагрузке для растяжения и сжатия, предоставляющий пользователю графический интерфейс с возможностью автоматического формирования модели, выбора деформирующего воздействия и значений параметров, сохранения полученных результатов в базе данных с возможностью их импорта и экспорта.

Апробация работы. Основные результаты работы докладывались и обсуждались на следующих конференциях и семинарах: Всероссийская конференция молодых ученых «Физическая мезомеханика материалов» (Томск, 2001, 2003), The Eight International Scientific and Practical Conference of Students, Post Graduates and Young Scientists «Modern Technique and Technologies» (Томск, 2002), Современные проблемы физики и технологии и инновационного развития (Томск, 2002, 2003), II Всероссийская конференция молодых ученых «Материаловедение, технологии и экология в третьем тысячелетии» (Томск, 2003), Зимняя школа по механике сплошных сред (тринадцатая) (Екатеринбург, 2003), VIII Всероссийская научно-техническая конференции «Механика летательных аппаратов и современные материалы» (Томск, 2002), The 7th Korea-Russia International Symposium on Science and Technology (Korea, Ulsan, 2003), 11th International Conference on Fracture (Turin, Italy, 2005), XIII международная научно-практическая конференция «Прикладные задачи математики и механики» (Севастополь, 2005), Межгосударственный семинар «Структурные основы модификации материалов методами нетрадиционных технологий (МНТ-VIII)» (Обнинск, 2005).

Публикации. По теме диссертации опубликовано 17 научных работ, в том числе 11 статей, получено свидетельство об официальной регистрации программы.

Структура и объем диссертации. Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, основных результатов и выводов, заключения и списка использованной литературы из 187 наименований. Диссертация изложена на 203 страницах, включая 62 рисунка и 20 таблиц.

Основное содержание работы

Во **введении** обоснована актуальность темы, сформулирована цель исследования, дается краткая характеристика разделов работы, приведены основные положения, выносимые на защиту.

Первая глава содержит обзор литературы, посвященной математическому моделированию пластической деформации ГЦК металлов и дисперсно-упрочненных материалов с использованием уравнений баланса деформационных дефектов. Вводятся необходимые определения жестких систем ОДУ и проводится анализ численных методов, пригодных для их решения. На основе результатов проведенного анализа сформулированы цели и основные задачи исследования.

Различные математические модели пластической деформации, включающие уравнения баланса деформационных дефектов, отличаются, прежде всего, набором учитываемых дефектов и механизмов их образования и аннигиляции. Одной из наиболее последовательно и детально разработанных моделей такого типа (Л.Е. Попов, В.С. Кобытев, С.Н. Колупаева, В.А. Старенченко, Т.А. Ковалевская и др.) является математическая модель пластической деформации скольжения (а точнее система математических моделей, разрабатываемых в рамках единой концептуальной модели, для различных материалов) в основе которой лежит сформулированная в конце 30-х годов прошлого столетия М.А. Большаниной концепция упрочнения как атермического процесса накопления деформационных дефектов и отдыха в результате термоактивируемого залечивания деформационных повреждений. Уравнения модели построены на основе анализа процессов, проис-

ходящих при формировании элементарного скольжения и зоны кристаллографического сдвига.

Математическая модель в общем виде включает: 1) уравнение, связывающее скорость деформации с напряжением и плотностью дислокаций; 2) уравнение, описывающее приложенное воздействие; 3) уравнения баланса деформационных дефектов. Математические модели для монокристаллов чистых ГЦК металлов, сформулированные в работах Л.Е. Попова, В.А. Старенченко, С.Н. Колупаевой, требуют существенного развития с учетом более полного набора деформационных дефектов, механизмов их генерации, аннигиляции и релаксационной трансформации. Математическая модель для дисперсно-упрочненных материалов требует уточнения распределения точечных дефектов между стоками различного типа.

В общем виде систему уравнений баланса деформационных дефектов можно представить следующим образом:

$$\frac{d\bar{X}}{da} = G(\bar{X}, \bar{Y}, a, t) - A(\bar{X}, \bar{Y}, a, t) - R(\bar{X}, \bar{Y}, a, t), \quad (1)$$

где \bar{X} - вектор переменных, характеризующих дефектную среду, \bar{Y} - вектор переменных, характеризующих внешнее воздействие, a - степень деформации сдвига, t - время, $G(\bar{X}, \bar{Y}, a, t)$, $A(\bar{X}, \bar{Y}, a, t)$, $R(\bar{X}, \bar{Y}, a, t)$ - функции генерации, аннигиляции и релаксационной трансформации деформационных дефектов соответственно. В качестве независимой переменной модели может быть выбрана степень деформации сдвига или время.

При численном решении систем ОДУ моделей пластической деформации скольжения возникают сложности, связанные с тем, что процессы генерации и аннигиляции деформационных дефектов являются разноскоростными, переменные системы являются разнопорядковыми величинами и изменяются на интервале интегрирования на порядки величины. В этом случае, как правило, приходится иметь дело с *жесткими* системами ОДУ, поэтому используемые вычислительные методы должны быть пригодными для их решения. При этом следует учитывать трудности, связанные с вычислением начального приближения, выбором начального шага интегрирования, управлением размером шага при сохранении необходимой точности решения; кроме того для различных деформирующих воздействий и материалов может отличаться число уравнений, сами уравнения могут быть кусочно-сшитыми.

Вторая глава посвящена обоснованию, общему описанию, выбору переменных и развитию математических моделей пластической деформации скольжения в ГЦК металлах и дисперсно-упрочненных сплавах на их основе. Все параметры моделей имеют ясный физический смысл.

При пластической деформации скольжения образуются, преимущественно, дислокации различного типа и точечные дефекты, определяющими механизмами их генерации являются процессы производства дефектов при формировании зон кристаллографического сдвига. Частные модели процессов генерации и аннигиляции деформационных дефектов получены в предположении, что: 1) процессы генерации дефектов происходят при формировании зон кристаллографического

сдвига и связаны с динамическими и масштабными характеристиками их формирования; 2) процессы аннигиляции носят преимущественно диффузионный характер, реализуются в дефектной среде, создаваемой совокупностью дефектов, порожденных скольжением в большом числе зон сдвига; 3) деформационная дефектная среда является однородной и содержит то же число дефектов, что и все зоны кристаллографического сдвига вместе взятые. Учтен полный набор взаимодействий между точечными дефектами, как деформационными, так и термодинамически равновесными.

Различными авторами рассмотрен ряд механизмов аннигиляции дислокаций и показано, что основными механизмами аннигиляции дислокаций являются переползание невинтовых дислокаций в результате осаждения на их экстраплоскостях точечных дефектов и аннигиляция винтовых дислокаций при их поперечном скольжении. В настоящей работе в частных моделях аннигиляции деформационных точечных дефектов рассмотрены следующие стоки: 1) для межузельных атомов – невинтовые дислокации, моно-, бивакансии; 2) для моновакансий – невинтовые дислокации, межузельные атомы, моновакансии; 3) для бивакансий – невинтовые дислокации, межузельные атомы. Образующиеся при встрече двух бивакансий или моно- и бивакансии комплексы точечных дефектов в настоящей работе не рассматриваются. Для аннигиляции дипольных дислокационных конфигураций рассмотрены следующие механизмы: 1) уменьшение плеча дислокационных диполей вакансионного типа до их аннигиляции при осаждении на них межузельных атомов и дислокационных диполей межузельного типа при осаждении на них моно- и бивакансий; 2) увеличение плеча дислокационных диполей вплоть до потери их устойчивости. Аналогичные механизмы аннигиляции рассмотрены для дислокационных призматических петель при осаждении на них точечных дефектов.

Частные модели механизмов генерации и аннигиляции деформационных дефектов создают основу для формирования моделей пластической деформации скольжения с различным набором уравнений баланса деформационных дефектов и учитываемых механизмов генерации и аннигиляции деформационных дефектов и дают возможность исследования роли различных механизмов и процессов в закономерностях пластического поведения и эволюции деформационной дефектной среды в монокристаллах ГЦК металлов и дисперсно-упрочненных сплавов на их основе при различных условиях деформирования и приложенных воздействиях.

В качестве переменных модели (1), характеризующих деформационную дефектную среду выбраны для металлов с ГЦК структурой сдвигообразующие дислокации (ρ_m), дислокации в дипольных конфигурациях вакансионного и межузельного типа (ρ_d^v, ρ_d^i), межузельные атомы (c_i), моно- (c_v) и бивакансии (c_{2v}), учитывается полный набор взаимодействий между точечными дефектами. Математическая модель пластической деформации скольжения ГЦК металлов может быть представлена в виде:

$$\frac{d\rho_m}{da} = (1 - \omega_s P_{as}) \frac{F}{Db} - \frac{2}{\omega} \rho_m \min(r_a, \rho_m^{-1/2}) [(1 - \omega_s) \rho_m b^2 (c_i Q_i + 2c_{2v} Q_{2v}) + c_i c_{1v} \omega_m^i Q_{1v} + c_{2v} c_i \omega_m^i Q_{2v} + c_{1v} \omega_m^{1v} (\rho_m b^2 + 2c_{1v} + c_i) Q_{1v} + c_i c_{1v} \omega_m^{1v} Q_i +$$

$$\begin{aligned}
& + 2c_i c_{2v} \omega_m^{2v} Q_i] + \frac{8\pi\tau_f (1-\nu)}{\mathfrak{G}Gb^2 (2-\nu)} [\omega_{dv}^{1v} c_{1v} (\rho_{ns} b^2 + 2c_{1v} + c_i) Q_{1v} + \omega_{dv}^{1v} c_{1v} c_i Q_i + \\
& + 2c_{2v} \rho_{dv} b^2 Q_{2v} + 2\omega_{dv}^{2v} c_{2v} c_i Q_i + c_i \rho_{di} b^2 Q_i + \omega_{di}^i c_i c_{1v} Q_{1v} + \omega_{di}^i c_i c_{2v} Q_{2v}] \\
\frac{d\rho_d^v}{da} = & \frac{1}{6\gamma_d \lambda_d(\rho) b} - \frac{8\pi\tau_f (1-\nu)}{\mathfrak{G}Gb^2 (2-\nu)} [c_i \rho_d^v b^2 Q_i + \omega_{dv}^i c_i (c_{1v} Q_{1v} + c_{2v} Q_{2v}) + \\
& + \omega_{dv}^{1v} c_{1v} ((\rho_{ns} b^2 + 2c_{1v} + c_i) Q_{1v} + c_i Q_i) + 2c_{2v} (\rho_d^v b^2 + c_i) Q_{2v} + 2\omega_{dv}^{2v} c_{2v} c_i Q_i] \\
\frac{d\rho_d^i}{da} = & \frac{1}{6\gamma_d \lambda_d(\rho) b} - \frac{8\pi\tau_f (1-\nu)}{\mathfrak{G}Gb^2 (2-\nu)} [\omega_{dv}^i c_{1v} ((\rho_{ns} b^2 + 2c_{1v} + c_i) Q_{1v} + c_i Q_i) + \\
& + 2c_{2v} \rho_d^v b^2 Q_{2v} + 2\omega_{dv}^i c_{2v} c_i Q_i + c_i \rho_d^i b^2 Q_i + \omega_{di}^i c_i (c_{1v} Q_{1v} + c_{2v} Q_{2v})] \\
\frac{dc_i}{da} = & q \frac{\tau_{dyn}}{G} - \frac{1}{\mathfrak{G}} [c_i (\rho_{ns} b^2 + c_{1v} + c_{2v}) Q_i + c_{1v} Q_{1v} + c_{2v} Q_{2v}], \\
\frac{dc_{1v}}{da} = & \frac{q\tau_{dyn}}{6G} - \frac{1}{\mathfrak{G}} [c_{1v} (\rho_{ns} b^2 + 2c_{1v} + c_i) Q_{1v} + c_i (c_{1v} - c_{2v}) Q_i - c_i c_{2v} Q_{2v}], \\
\frac{dc_{2v}}{da} = & \frac{5q}{6} \frac{\tau_{dyn}}{G} - \frac{2}{\mathfrak{G}} [c_{2v} (\rho_{ns} b^2 + c_i) Q_{2v} + c_i Q_i] - c_{1v} c_{1v} Q_{1v}, \\
\mathfrak{G} = & \frac{8\beta_r^{1/2} (\tau - \tau_a)^{1/3} v_D b^{2/3} \rho^{1/3} B_r \tau}{\pi(1-\beta_r)^{2/3} \xi^{1/6} G^{4/3} \lambda(\tau, \rho) F} \exp\left[-\frac{U - (\tau - \tau_a)\lambda(\tau, \rho)\rho^{-1/2} b^2}{kT}\right].
\end{aligned} \tag{2}$$

Здесь $U_j^{(m)}$ – энергия миграции точечного дефекта j -го типа, ω_s – доля винтовых дислокаций, ω_n^j – доля точечных дефектов j -го типа, ушедших на стоки n -го типа, значение F определяется формой дислокационных петель и их распределением в зоне сдвига, β_r – доля реагирующих дислокаций леса, k – постоянная Больцмана, τ_a – атермическая составляющая сопротивления движению скользящей дислокации, τ_{dyn} – разность между деформирующим напряжением и сопротивлением движению дислокаций при формировании зоны сдвига, для статических условий деформации $\tau_{dyn} = \alpha_{dyn} G b \rho^{1/2}$, τ – деформирующее напряжение, τ_f – напряжение трения, G – модуль сдвига, a – деформация сдвига, $Q_j = v_d Z \exp(-U_j^{(m)} / kT)$, v_D – частота Дебая, b – модуль вектора Бюргерса, $\rho_{ns} = ((1 - \omega_s) \rho_m + \rho_d)$, $D = B_r \tau / (G b \rho)$ – диаметр зоны сдвига, B_r – вычисляемый параметр, ν – коэффициент Пуассона, ξ – доля дислокаций леса, q – параметр интенсивности генерации точечных дефектов, λ_d – длина пробега винтовых компонент дислокации, U – энергия активации преодоления стопора. Уравнение для скорости деформации записано в предположении, что время формирования зоны сдвига определяется временем термоактивируемого продвижения дислокационного сегмента-источника до преодоления им критической конфигурации. Для дисперсно-упрочненных материалов система уравнений (2) включает также уравнения баланса для дислокационных призматических петель вакансионного и межузельного типа (ρ_p^v, ρ_p^i).

Система уравнений (2) должна быть дополнена уравнением (или уравне-

ниями), описывающим физическое воздействие, которое является причиной деформации. Для случая деформирования кристалла с постоянной скоростью деформации это уравнение имеет вид $\dot{\epsilon} = \text{const}$ и позволяет найти значение приложенного напряжения τ . В работе также приведены результаты для: 1) деформации при постоянном приложенном напряжении ($\tau = \text{const}$); 2) деформации при постоянной нагрузке ($P = \text{const}$). В последнем случае действующее напряжение определяется как $\tau = \tau_0 \exp(a/k_s)$ (растяжение) или $\tau = \tau_0 \exp(-a/k_s)$ (сжатие), где k_s – множитель Закса.

Проведенный анализ показывает, что решения системы (2) не существует при $\dot{\epsilon} = 0$, $\tau_{dyn} = 0$, $\tau = 0$, $\tau_f = 0$, $T = 0$, $G = 0$, $\Lambda_p = 0$, $\delta = 0$, $\rho_m = 0$; решение не единственное при $\rho < 0$. При любых физически реальных значениях переменных и параметров модели решение системы (2) существует и является единственным.

В **третьей главе** описана структура и интерфейс комплекса SPFCC, выбран численный метод для решения системы ОДУ математической модели пластической деформации (2), разработаны алгоритмы его реализации, выбрана система управления базой данных результатов расчетов, способ подключения клиентского приложения к базе данных.

Для реализации математической модели пластической деформации скольжения (2) разработан комплекс прикладных программ Slip Plasticity of Face-Centered Cubic v1.0 (SPFCC). Все модули программного комплекса написаны на языке программирования Object Pascal в среде Delphi 6. Комплекс работает под управлением Microsoft Windows 2000/XP. Пакет прикладных программ позволяет проводить расчеты для случая деформирования кристалла с постоянной скоростью деформации, при постоянном приложенном напряжении, при постоянной нагрузке для растяжения и сжатия. При написании пакета программ использован объектно-ориентированный подход, который обеспечивает разработчику гибкую возможность дальнейшей модификации, расширения пакета новыми программными модулями, предназначенными для описания различных типов материалов и воздействий (в настоящее время для этих целей в пакет заложено 8 модулей) или альтернативными численными методами решения задач.

Целевая аудитория: студенты, аспиранты, специалисты, занимающиеся исследованиями в области пластичности и прочности. Для работы с пакетом необходимо знакомство с основами работы приложений под управлением Microsoft Windows. Пользователь имеет возможность сформировать явный вид системы (1) в диалоговом режиме или выбрать по умолчанию (в этом случае учитывается максимальный возможный набор дефектов и механизмов).

Разработанный программный комплекс SPFCC включает следующие блоки: 1) **исходные данные модели** (инициализация значений параметров модели); 2) **расчетный блок** (обеспечивает численное решение системы ОДУ); 3) **база данных** (организация упорядоченного хранения данных и методы доступа к ним); 4) **справка** (отвечает за информационное обеспечение пользователя в ходе работы с программой); 5) **головной модуль** (осуществляет загрузку/выгрузку ресурсов программы, управление модулями, взаимодействие с пользователем).

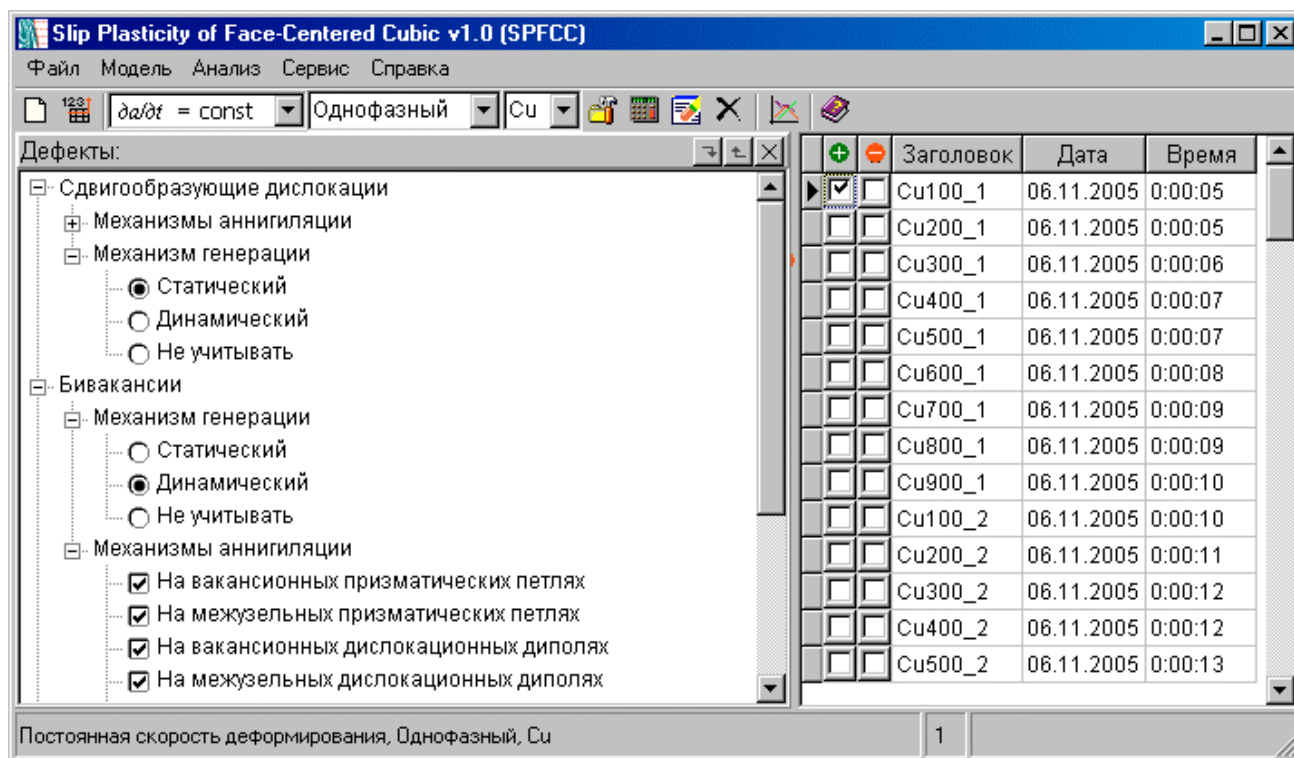


Рис. 1. Главное окно комплекса программ SPFCF.

Взаимодействие с программой происходит через графический интерфейс (рис. 1), где в ходе диалога определяются значения параметров модели и начальные условия. Входными данными программы являются *исходная плотность дислокаций различного типа и концентрации точечных дефектов; значения параметров, характеризующих материал* (модуль сдвига, энергия образования и миграции точечных дефектов, коэффициент Пуассона, модуль вектора Бюргерса и т.п.); *условия деформирования; нефизические (вспомогательные) величины* (минимальный и максимальный шаги интегрирования, интервал интегрирования, погрешность вычислений). В случае задания пользователем неверных значений параметров (например, значение параметра не имеет физического смысла) происходит автоматическая корректировка. Все значения параметров сохраняются в базе данных, при необходимости эту информацию можно просмотреть в ходе работы программы или выгрузить в текстовый файл.

Расчетный блок комплекса SPFCF состоит из 16 основных подпрограмм. На рис. 2 приведена принципиальная схема взаимодействия процедур внутри *Расчетного блока*. Линии, соединяющие две процедуры, показывают, что «верхняя» процедура вызывает «нижнюю».

Для нахождения решения системы (2) в программе использованы: явный линейный многошаговый метод Адамса (нахождение точек разгона) и линейный многошаговый метод Гира переменного порядка (в форме формул дифференцирования назад), который устойчив при любой величине шаге интегрирования, и поэтому шаг интегрирования можно выбирать, руководствуясь лишь соображениями точности, а не устойчивости. Метод Гира неявный, поэтому на каждом шаге вычислений строится прогноз:

$$\begin{cases} Z_n^{[0]} = Z_{n-1} A, \\ e_n^{[0]} = 0, \end{cases}$$

который затем сопровождается коррекцией:

$$\left. \begin{aligned} g(Y_n^{[m]}) &= h_n F(Y_n^{[m]}) - h_n Y_n^{[0]} - e_n^{[m]}, \\ e_n^{[m+1]} &= e_n^{[m]} + P^{-1} g(Y_n^{[m]}), \\ Y_n^{[m+1]} &= h_n Y_n^{[0]} - \lambda_0 e_n^{[m+1]} \end{aligned} \right\} m = 0, 1, \dots, M-1, \quad \begin{cases} e_n = e_n^{[M]}, \\ Z_n = Z_n^{[0]} + e_n \lambda. \end{cases}$$

Здесь $Z_n = \left(Y_{n-1}, h_n Y_{n-1}', \frac{h_n^2}{2!} Y_{n-1}'', \dots, \frac{h_n^q}{q!} Y_{n-1}^{(q)} \right)$ – вектор Нордсика в точке x_n , A – матрица Паскаля, $Y_n^{[0]}$ – начальное приближение в точке x_n , $Y_n^{[m]}$ – аппроксимация решения в точке x_n , $Y_n^{[m]}$ – производная q -го порядка, e_n – вектор ошибок коррекции, m – номер итерации, λ – вектор коэффициентов численного метода, P – итерационная матрица.

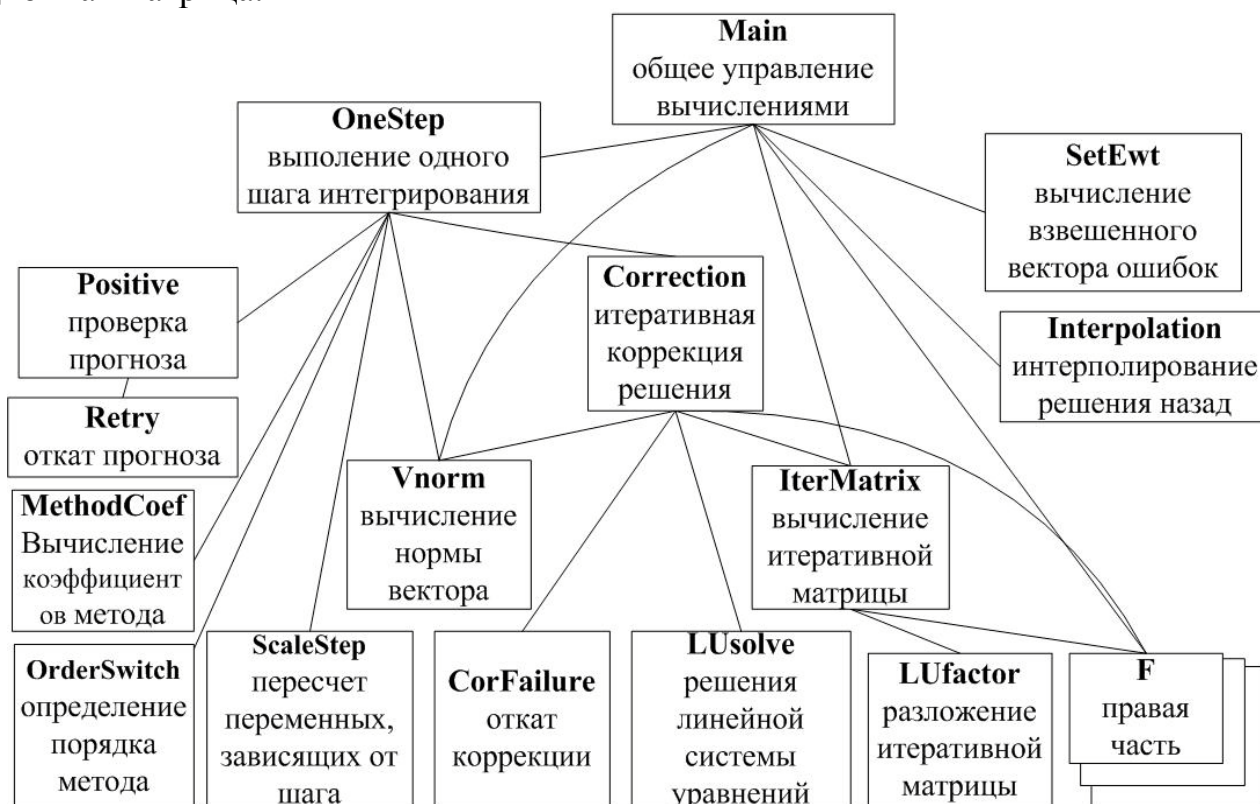


Рис. 2. Схема взаимодействия процедур внутри Расчетного блока.

Алгоритм численного метода интегрирования жесткой системы ОДУ

1. Инициализация начальных данных.
2. Построить точки разгона $Y_{n-1}, \dots, Y_{n-q+1}$.
3. Сформировать (скорректировать) вектор Нордсика $Z_n^{[0]}$.
4. Построить вектор прогноза $Y_n^{[0]}$. Если тест на положительность вектора прогноза $Y_n^{[0]}$ пройден, то перейти на шаг 5, иначе уменьшить шаг h_n и перейти на шаг 3.
5. Вычислить Якобиан J и обратить итерационную матрицу $P = E - h_n \lambda_0 J$.

6. Провести итеративное уточнение вектора прогноза $Y_n^{[m]}$, $m=1,2, \dots, M-1$. Это может потребовать повторного использования шагов 4, 5 в случае уменьшения шага h_n .

7. Если заданная точность достигнута, то перейти на шаг 8, иначе уменьшить шаг интегрирования h_n и перейти на шаг 3.

8. Если достигнут правый предел интегрирования, то запомнить решение Y_n и выход, иначе перейти на шаг 9.

9. Запомнить решение Y_n , перейти в новую точку $x_{n+1} = x_n + h_n$ и на шаг 3.

Якобиан системы (2), необходимый на этапе коррекции, вычисляется по формулам численного дифференцирования. Результаты тестирования *расчетного блока* на жестких задачах, аналитическое или табличное решения которых известны из литературы (задача Ван дер Поля, модель Робертсона, задача Крога), свидетельствуют о надежности методов и алгоритмов, используемых в программе SPFCC.

Для различных деформирующих воздействий (постоянная нагрузка, постоянная скорость деформирования, постоянное напряжение) и материалов (ГЦК металлы, дисперсно-упрочненные материалы) набор учитываемых деформационных дефектов и механизмов их образования и аннигиляции пользователь может задать через выбор переключателей на панели «Дефекты», или воспользоваться выбором по умолчанию. Для хранения информации о выбранных механизмах генерации, аннигиляции и релаксационной трансформации дефектов используется вектор коэффициентов $C[k]$, $k = 1,2, \dots, m$, где m - общее количество механизмов в базовой (включающей полный набор механизмов) математической модели пластической деформации скольжения (для ГЦК металлов и дисперсно-упрочненных материалов на их основе m различно). На входе процедуры обхода дерева «Дефекты» элементы вектора коэффициентов C равны нулю, после обхода дерева (на выходе) $C[k]=1$, если механизм включен в модель (пользователь выделил соответствующий переключатель или кнопку выбора дерева «Дефекты» (рис. 1)).

В ходе вычислительных экспериментов полученные результаты автоматически сохраняются в локальной реляционной СУБД Microsoft Access (блок *база данных*). Пользователь не обременен рутинными операциями по работе с файлами, кроме того, благодаря использованию базы данных, у него есть возможность вернуться к ранее сохраненным результатам вычислений и провести сравнение и анализ данных, относящихся к различным наборам значений параметров математической модели пластической деформации скольжения. Предусмотрена возможность просмотра и сохранения результатов моделирования в графическом виде (формат Windows Metafile) либо выгрузки результатов в текстовый файл.

Программа позволяет проводить серии расчетов, для этого необходимо выбрать варьируемый параметр модели (например, температуру, скорость деформирования или начальную плотность сдвигообразующих дислокаций), нижний и верхний предел его изменения и шаг.

В **четвертой главе** приведены результаты использования комплекса программ SPFCC для описания закономерностей пластической деформации и эволюции деформационной дефектной среды при деформации с постоянной скоростью деформирования, при постоянном приложенном напряжении и при постоянной

нагрузке (в условиях растяжения и сжатия) для ГЦК металлов и дисперсно-упрочненных материалов с недеформируемыми частицами второй фазы.

Проведены расчеты кривых деформационного упрочнения, эволюции дефектной подсистемы и латентной энергии пластической деформации ГЦК металлов в различных условиях. Проведен анализ влияния характеристик материала, деформирующего воздействия и исходного дефектного состояния материала на закономерности деформационного упрочнения и развитие деформационной дефектной подсистемы в ГЦК металлах. Используются значения параметров, характерных для наиболее полно представленных теоретическими и экспериментальными исследованиями монокристаллов меди, а также никеля и алюминия: $F=4,7$, $\omega_s=0,3$, $q=8$, $\nu_D=10^{13} \text{ c}^{-1}$, $\beta_r=0,14$, $\tau_f=1 \text{ МПа}$, $\xi=0,5$, $Z=12$, $B_r=800$, $\nu=0,33$, $b=2,5 \cdot 10^{-10} \text{ м}^{-2}$, $k=1,38 \cdot 10^{-23} \text{ Дж/К}$, $\mathcal{A}=10^{-4} \text{ c}^{-1}$.

На рис. 3 приведены кривые деформационного упрочнения для монокристалла меди при различных температурах, полученные с помощью компьютерного эксперимента, и экспериментальные данные.

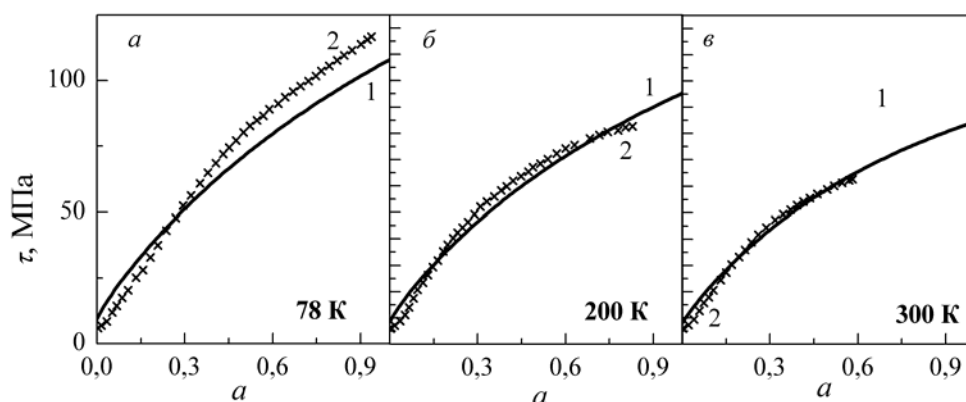
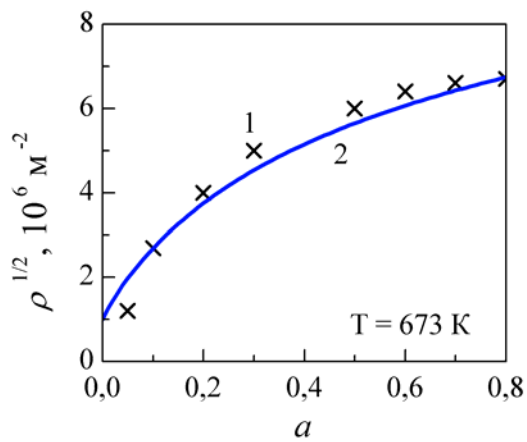


Рис. 3. Кривые деформационного упрочнения монокристалла меди при различных температурах: 1 – модельные данные, 2 – экспериментальные данные [Seeger A., Diehl J., Mader S., Rebstock H. // Phil. mag. - 1957. - №. 15.- P. 323-350].

На рис. 4 приведена зависимость квадратного корня из плотности дислокаций от степени деформации (расчетные и экспериментальные данные).

Кривые ползучести, полученные в случае испытания при постоянной нагрузке, существенно отличаются от кривых ползучести, полученных при постоянном напряжении (рис. 5). Кроме стадии I неустановившейся ползучести и следующей за ней стадии II с приблизительно постоянной скоростью деформации, которую можно условно отождествить со стадией установившейся ползучести, при постоянной нагрузке (растяжение) появляется еще и стадия III с катастрофически нарастающей скоростью.

На рис. 6 приведены вклады дислокаций различного типа в суммарную плотность дислокаций при различных температурах деформации для дисперсно-упрочненного материала на основе меди. При средних температурах на разных этапах деформации преобладают различные составляющие дислокационной подсистемы. Существуют интервалы деформации, где их вклад примерно одинаков. При высоких температурах деформации (693-893K), когда дислокации в дипольных конфигурациях не образуются, сдвигообразующие дислокации и дислокационные призматические петли вакансионного и межузельного типа вносят соизмеримый вклад в общую плотность дислокаций.



15

Рис. 4. Зависимость квадратного корня из плотности дислокаций от степени деформации. 1 – экспериментальные данные [Попов Л.Е., Кобытев В.С., Ковалевская Т.А. Пластическая деформация металлов. - М.: Металлургия, 1984. – 182 с.], 2 – модельные кривые. Монокристалл меди, $\rho_m^{(0)} = 10^{12} \text{ м}^{-2}$.

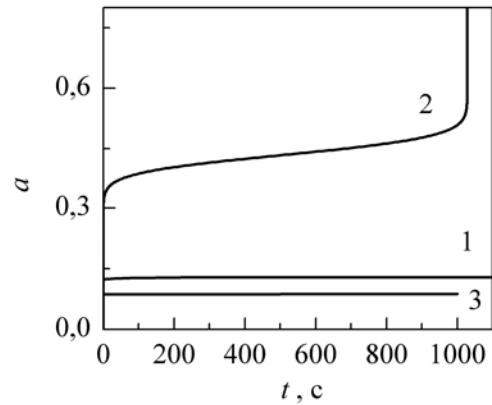


Рис. 5. Кривые ползучести при постоянном напряжении 23,25 МПа (1) и при постоянной нагрузке 23,25 МПа (2 – растяжение, 3 – сжатие). Монокристалл меди, напряжение трения 0,75 МПа, $T = 400 \text{ K}$.

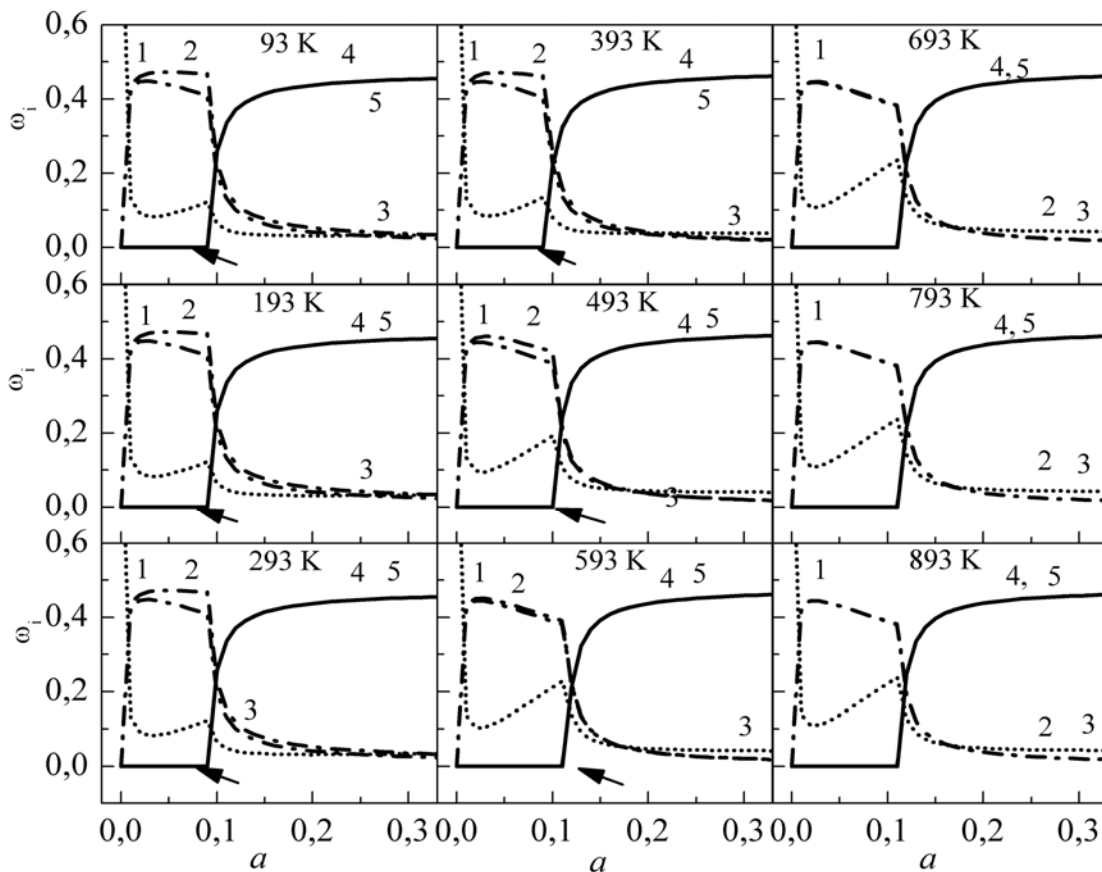


Рис.6. Вклад дислокаций различного типа в общую плотность при различных температурах деформации ($\omega_i = \rho_i / \rho$): 1 – доля сдвигообразующих дислокаций, 2, 3 – доля дислокаций в призматических петлях вакансионного и межузельного типа, 4, 5 – доля дислокаций в дипольных конфигурациях вакансионного и межузельного типа. Дисперсно-упрочненный материал на основе меди с частицами диаметром 0,05 мкм и расстоянием между ними 1 мкм, $\dot{\epsilon} = 10^{-2} \text{ с}^{-1}$.

Полученные с использованием программы SPFCC результаты исследования закономерностей деформационного упрочнения и эволюции деформационной дефектной подсистемы в ГЦК металлах и дисперсно-упрочненных материалах согласуются с данными реального и вычислительного эксперимента, имеющимися в литературе. Комплекс программ SPFCC может быть легко расширен новыми модулями с альтернативными методами решения систем ОДУ или моделями пластической деформации для других материалов либо других приложенных воздействий.

Основные результаты и выводы

1. Сформулирована математическая модель пластической деформации скольжения в монокристаллах чистых металлов с ГЦК структурой, включающая уравнения баланса сдвигообразующих дислокаций, дислокаций в дипольных конфигурациях вакансионного и межузельного типа, межузельных атомов, моно- и бивакансий, в которой учтены основные механизмы генерации, аннигиляции и релаксационной трансформации и полный набор взаимодействий между точечными дефектами.

2. Для разработки комплекса программ для исследования пластической деформации скольжения на основе анализа существующих математических моделей механизмов генерации и аннигиляции деформационных дефектов в ГЦК материалах сформирована система частных моделей механизмов генерации, аннигиляции и релаксационной трансформации деформационных дефектов для ГЦК металлов и дисперсно-упрочненных материалов, записанных на основе единых предположений, и базовые модели, включающие наиболее полный набор деформационных дефектов (сдвигообразующие дислокации, дислокации в дипольных конфигурациях вакансионного и межузельного типа, дислокационные призматические петли вакансионного и межузельного типа, межузельные атомы, моно- и бивакансии) и механизмов их образования и аннигиляции.

3. Показано, что решение системы обыкновенных дифференциальных уравнений различной жесткости с заданной точностью может быть обеспечено при использовании для старта многошагового метода прогноза-коррекции Адамса, далее для адаптации к локальному поведению решения и сокращению объема вычислений при соблюдении требуемой точности используется жесткоустойчивый неявный метод Гира переменного порядка с автоматическим выбором шага интегрирования. Проведенное тестирование вычислительного модуля на системах уравнений различной жесткости, имеющих аналитическое или табличное решение, известное по литературным данным, свидетельствует о его надежности и точности.

4. Разработаны алгоритмы реализации численных методов интегрирования жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений модели пластической деформации скольжения, учитывающие, что модель является кусочно-сшитой и при достижении в процессе расчетов некоторых условий изменяется число уравнений либо их правая часть, учтены физические ограничения на переменные. Предусмотрена возможность получать и визуализировать в реальном времени информацию о состоянии вычислений.

5. Разработана структура специализированного пакета прикладных программ для исследования пластической деформации скольжения SPFCC, которая включает в себя клиентское приложение и базу данных. Пакет позволяет проводить исследования для деформации с постоянной скоростью деформирования, при постоянном приложенном напряжении и при постоянной нагрузке (в условиях растяжения и сжатия). В программе предусмотрена возможность проведения серий вычислений, выбора учитываемых деформационных дефектов (переменных модели), включения/отключения механизмов генерации, аннигиляции и релаксационной трансформации деформационных дефектов.

6. Программный продукт SPFCC разработан с использованием языка программирования Object Pascal под управлением операционной системы Microsoft Windows. Пакет предоставляет пользователю графический интерфейс для проведения активного вычислительного эксперимента (компьютерной имитации) и исследования закономерностей пластической деформации в монокристаллах ГЦК металлов и дисперсно-упрочненных сплавов с некогерентной упрочняющей фазой. На уровне интерфейса пользователя проводится проверка корректности задания значений параметров модели.

7. База данных, входящая в состав пакета прикладных программ, обеспечивает удобную среду хранения, выборки и представления полученных результатов (в том числе относящихся к различным условиям внешнего воздействия) как в текстовом, так и визуальном (графическом) виде.

8. С использованием пакета SPFCC для широкого спектра значений параметров модели исследованы закономерности деформационного упрочнения, эволюции дефектной подсистемы и латентной энергии пластической деформации для монокристаллов меди, никеля и алюминия и дисперсно-упрочненных материалов на их основе для активной деформации с постоянной скоростью деформирования, постоянного приложенного напряжения и постоянной нагрузки (в условиях растяжения и сжатия). Полученные результаты компьютерного моделирования согласуются с данными реальных и вычислительных экспериментов, имеющимися в литературе.

Основное содержание диссертационной работы изложено **в следующих публикациях:**

1. *Семенов М. Е.* About one approach of research endurance of heterogeneous material and structure. // The eight International Scientific and Practical Conference of Students, Post Graduates and Young Scientists «Modern Technique and Technologies». - Tomsk: Tomsk polytechnic university, 2002. – P. 124.

2. *Семенов М.Е.* Разработка информационной системы по оптимизации механических свойств гетерогенных материалов и структур // В сборнике: Современные проблемы физики и технологии. - Томск: Издательство ТГУ, 2002. – С. 34-36.

3. *Семенов М.Е.* Разработка пакета программ для описания эволюции дефектной подсистемы в деформируемых г.ц.к. материалах // В сборнике: Современные проблемы физики и технологии и инновационного развития. – Томск: Издательство ТГУ, 2003. – С. 43-47.

4. *Семенов М.Е., Колупаева С.Н.* Выбор метода расчетов для жестких систем дифференциальных уравнений при моделировании закономерностей пластиче-

ской деформации скольжения // Тезисы докладов V Всероссийской конференции молодых ученых «Физическая мезомеханика материалов». – Томск: ИФПМ СО РАН, 2003. – С. 67–68.

5. Семенов М.Е., Колупаева С.Н. Разработка пакета программ для моделирования закономерностей пластической деформации скольжения в ГЦК-материалах // Материалы II Всероссийской конференции молодых ученых «Материаловедение, технологии и экология в третьем тысячелетии». – Томск: ИФПМ СО РАН, 2003. – С. 336 – 337.

6. Semenov M.E., Kolupaeva S.N. Development of computer program for the description of plastic deformation by slip // The 7th Korea-Russia International Symposium on Science and Technology (KORUS 2003), 2003. – P. 401–404.

7. Колупаева С.Н., Семенов М.Е. Латентная энергия пластической деформации дисперсно-упрочненных материалов с недеформируемыми частицами / Том. гос. архит.-строит. ун-т. – Томск, 2004. – 41 с. – Деп. в ВИНТИ 06.08.2004, № 1372–В2004.

8. Семенов М.Е., Колупаева С.Н. Автоматизация расчетов закономерностей пластической деформации в г.ц.к. материалах при деформации // Доклады Томского государственного университета систем управления и радиоэлектроники. Автоматизированные системы обработки информации, управления и проектирования. – Томск, 2003. – Т.8. – С.127–133.

10. Kolupaeva S.N., Puspesheva S.I., Semenov M.E. Mathematical modeling of temperature and rate dependences of strain hardening in f.c.c. metals // Abstract Book. 11th International Conference on Fracture. – Turin (Italy), 2005. – P. 847.

11. Колупаева С.Н., Семенов М.Е. Пакет прикладных программ для исследования пластической деформации скольжения в г.ц.к. материалах // Вестник ТГАСУ. – 2005. – № 1. – С.36–46.

12. Колупаева С.Н., Семенов М.Е. Пакет прикладных программ исследования пластической деформации скольжения // Прикладные задачи математики и механики. Материалы XIII международной научно-практической конференции. Севастопольский национальный технический университет, 12–16 сентября 2005. – Севастополь: Издательство СевНТУ, 2005. – С.3–7.

13. Семенов М.Е., Колупаева С.Н. Математическое моделирование пластической деформации скольжения в г.ц.к. металлах // Структурные основы модификации материалов методами нетрадиционных технологий (МНТ – VIII). Тезисы докладов. – Обнинск: 2005. – С.94–95.

Изд.лиц. № 021253 от 31.10.97. Подписано в печать 2005
Бумага офсет. Гарнитура Таймс, печать офсет. Уч.-изд.л. 1,0 Тираж 100 экз.
Заказ №

Изд-во ТГАСУ, 634003, Томск, пл.Соляная, 2
Отпечатано с оригинал-макета ООП ТГАСУ
634004, Томск, ул.Партизанская, 15