УДК 539.4

НЕЛИНЕЙНОЕ УПРОЧНЕНИЕ НЕРАВНОМЕРНО РАСПРЕДЕЛЕННЫХ НЕСТАБИЛЬНЫХ ФАЗОВЫХ СТРУКТУР

© 2009 В.О. Левченко, А.В. Мантуленко, А.Л. Сараев[1]

В статье построены математические модели процесса фазовых превращений в нестабильной упругой среде, элементы фазовой структуры которой образуются и распределяются в пространстве неравномерно. Рассмотрено два типа структур. В первом случае новая фаза образует скопления в виде отдельных включений. Во втором случае новая и старая фазы образуют скопления в виде взаимопроникающих каркасов. Статистическое осреднение нелинейных систем уравнений равновесия неравномерно распределенных микронеоднородных сред с нестабильными компонентами позволяет установить их макроскопические определяющие уравнения и вычислить соответствующие эффективные характеристики.

Ключевые слова: определяющие уравнения, фазовые превращения, эффективные характеристики, микроструктура, статистическое осреднение.

1. Эффективные свойства среды со скоплениями зародышей фаз в виде отдельных объемов

Пусть упругая среда, в которой происходит фазовый переход первого рода, занимает объем V, ограниченный поверхностью S. Объем зарождающейся и развивающейся новой фазы обозначим V_f, объем старой фазы — V_m.

Кроме того, обозначим объем, занимаемый скоплениями включений W_f, а объем оставшийся части матрицы — W_m. Таким образом, вся рассматриваемая среда представляет собой двухкомпонентную фазовую структуру, в которой включениями являются объемы скоплений, а каждый элемент скоплений включений в свою очередь представляет собой двухкомпонентный композит с равномерным распределением зародышей.

[1]Левченко Вадим Олегович (ssumonk@yandex.ru), Мантуленко Алексей Вячеславович (mantulenko83@mail.ru), Сараев Александр Леонидович (alex_saraev@mail.ru), кафедра математики, информатики и математических методов в экономике Самарского государственного университета, 443011, Россия, г. Самара, ул. Акад. Павлова, 1.

При этом выполняются элементарные соотношения

$$V_m + V_m = V, \qquad W_m + W_f = V, \qquad (V_m > W_m, V_f < W_f)\,.$$

При фазовом превращении ($V_f \to V_m$) в материале новой фазы под воздействием внешних нагрузок возникают и развиваются необратимые структурные деформации $\alpha_{ij}(\mathbf{r})$, вызванные перестройкой кристаллической и доменной структуры материала. Эти деформации являются ограниченными предельными сдвигами двойниковых доменов $0 \leqslant \alpha \leqslant \alpha_{\max}$, $\alpha = \sqrt{\alpha_{ij}\alpha_{ij}}$, где $\alpha_{\max}$ — максимальный уровень структурных деформаций. Закон Гука такой среды имеет вид

$$\begin{array}{ll} \sigma_{ij} = 2\mu_m\varepsilon_{ij} + \delta_{ij}\lambda_m\varepsilon_{pp}, & \mathbf{r} \in V_m, \\ \sigma_{ij} = 2\mu_f\left(\varepsilon_{ij} - \alpha_{ij}\right) + \delta_{ij}\lambda_f\varepsilon_{pp}, & \mathbf{r} \in V_f. \end{array} \tag{1.1}$$

Здесь $\sigma_{ij}, \varepsilon_{ij}$ — тензоры напряжений и полных деформаций, μ_s, λ_s $(s = 1, 2)$ — параметры Ламе компонентов.

В качестве условий фазовых переходов второго компонента в первый и обратно принимаются поверхности нагружения

$$\begin{array}{ll} (s_{ij} - 2n_+\alpha_{ij})\,(s_{ij} - 2n_+\alpha_{ij}) = k_+^2 & (V_m \to V_f)\,, \\ (s_{ij} - 2n_-\alpha_{ij})\,(s_{ij} - 2n_-\alpha_{ij}) = k_-^2 & (V_f \to V_m)\,. \end{array} \tag{1.2}$$

Здесь

$$\begin{array}{l} k_{+,-}(\alpha) = k_{+,-}^{\infty} + \left(k_{+,-}^{0} - k_{+,-}^{\infty}\right)\left(1 - e^{-\lambda_{+,-}\alpha}\right), \\ n_{+,-}(\alpha) = n_{+,-}^{\infty} + \left(n_{+,-}^{0} - n_{+,-}^{\infty}\right)\left(1 - e^{-\lambda_{+,-}\alpha}\right), \end{array}$$

$k_{+,-}^{0,\infty}$ — начальный и конечный пределы прямого и обратного фазовых переходов, соответственно, $n_{+,-}^{0,\infty}$ — начальный и конечный коэффициенты упрочнения, $\lambda_{+,-}$ — параметр, характеризующий скорость перемещения поверхностей (1.2) в шестимерном пространстве напряжений. Экспериментальные наблюдения показывают, что эти характеристики зависят от температуры, и их значения определяют тип поведения нестабильной среды (сверхупругость, эффект "памяти формы" или обычное пластическое течение).

Геометрическая структура такого двухкомпонентного материала описывается случайной изотропной индикаторной функцией координат $\kappa(\mathbf{r})$, равной нулю в точках старой фазы и единице в точках новой. С помощью этой функции локальный закон Гука для среды записывается в виде

$$\begin{array}{l} s_{ij}(\mathbf{r}) = 2(\mu_m + [\mu]\kappa(\mathbf{r}))e_{ij}(\mathbf{r}) - 2\mu_m\alpha_{ij}(\mathbf{r}), \\ \sigma_{pp}(\mathbf{r}) = 3\left(K_m + [K]\kappa(\mathbf{r})\right)\varepsilon_{pp}(\mathbf{r}). \end{array} \tag{1.3}$$

Здесь $s_{ij} = \sigma_{pp} - \dfrac{1}{3}\delta_{ij}\cdot\sigma_{ij}$, $e_{ij} = \varepsilon_{ij} - \dfrac{1}{3}\sigma_{ij}\cdot\varepsilon_{pp}$, $K_{m,f} = \dfrac{2}{3}\mu_{m,f} + \lambda_{m,f}$, квадратными скобками обозначены разрывы величин при переходе фазовой границы — $[Q] = Q_f - Q_m$. Структурные деформации удовлетворяют условию несжимаемости $\alpha_{pp}(\mathbf{r}) = 0$.

Индикаторная функция $\kappa(\mathbf{r})$, напряжения, полные и структурные деформации предполагаются статистически однородными и эргодическими полями, поэтому их математические ожидания совпадают со средними значениями по полному объему V, объемам фаз $V_{m,f}$ и W_f [1]

$$\langle Q\rangle = \frac{1}{V}\int\limits_V Q(\mathbf{r})d\,\mathbf{r},\quad \langle Q\rangle_w = \frac{1}{W_f}\int\limits_{W_f} Q(\mathbf{r})d\,\mathbf{r},\quad \langle Q\rangle_{m,f} = \frac{1}{V_{m,f}}\int\limits_{V_{m,f}} Q(\mathbf{r})d\,\mathbf{r},$$

угловыми скобками обозначена операция осреднения.

Для установления макроскопических определяющих уравнений материала и вычисления его эффективных характеристик необходимо усреднить по полному объему W_f локальный закон Гука (1.3)

$$\begin{aligned}\langle s_{ij}\rangle_w &= 2\mu_m\langle e_{ij}\rangle_w + 2[\mu]\frac{c_v}{c_w}\langle e_{ij}\rangle_f - 2\mu_m\langle\alpha_{ij}\rangle_w,\\ \langle\sigma_{pp}\rangle_w &= 3K_m\langle\varepsilon_{pp}\rangle_w + 3[K]\langle\varepsilon_{pp}\rangle_f.\end{aligned}\tag{1.4}$$

Здесь $c_v = \dfrac{V_f}{V}$ — объемное содержание зародышей новой фазы, $c_w = \dfrac{W_f}{V}$ — объемное содержание скоплений включений.

Соотношения (1.4) показывают, что для установления эффективного закона Гука необходимо выразить величины $\langle e_{ij}\rangle_f$, $\langle\varepsilon_{pp}\rangle_f$ через макроскопические деформации.

Для этого усредним систему интегральных уравнений равновесия, ядрами которой являются вторые производные тензора Грина [1]

$$\varepsilon'_{ij}(\mathbf{r}) = \int\limits_{W_f}\mathbf{G}_{ik,lj}(\mathbf{r}-\mathbf{r}_1)\,\tau'_{kl}(\mathbf{r}_1)\,d\,\mathbf{r}_1.\tag{1.5}$$

Умножая уравнения (1.5) на $\kappa'(\mathbf{r})$, усредняя их по объему V и принимая во внимание изотропность структуры композита, находим [2]

$$\begin{aligned}\langle e_{ij}\rangle_f &= \frac{1}{1+\alpha_m\left(1-\frac{c_v}{c_w}\right)(m-1)}\left(\langle e_{ij}\rangle_w + m\left(\frac{1}{c_v}-\frac{1}{c_w}\right)\alpha_m\langle\alpha_{ij}\rangle_w\right),\\ \langle\varepsilon_{pp}\rangle_f &= \frac{1}{1+\gamma_m\left(1-\frac{c_v}{c_w}\right)(q-1)}\langle\varepsilon_{pp}\rangle_w.\end{aligned}\tag{1.6}$$

Здесь $\alpha_m = \dfrac{2}{15}\dfrac{4-5v_m}{1-v_m}$, $\gamma_m = \dfrac{1}{3}\dfrac{1+v_m}{1-v_m}$, $v_m = \dfrac{1}{2}\dfrac{3K_m-2\mu_m}{3K_m+2\mu_m}$, $m = \dfrac{\mu_f}{\mu_m}$, $q = \dfrac{K_f}{K_m}$.

Подстановка формул (1.6) в соотношения (1.4) дает макроскопический закон Гука рассматриваемой микронеоднородной среды

$$\langle s_{ij}\rangle_w = 2\mu_w\langle e_{ij}\rangle_w - 2\mu_w^\alpha\langle\alpha_{ij}\rangle_w,\qquad \langle\sigma_{pp}\rangle_w = 3K_w\langle\varepsilon_{pp}\rangle_w.\tag{1.7}$$

Здесь

$$\mu_w = \mu_m\left[1+\frac{\frac{c_v}{c_w}(m-1)}{1+\alpha_m\left(1-\frac{c_v}{c_w}\right)(m-1)}\right],$$

$$K_w = K_m \left[1 + \frac{\frac{c_v}{c_w}(q-1)}{1+\gamma_m\left(1-\frac{c_v}{c_w}\right)(q-1)}\right], \ \mu_w^\alpha = 1 + \frac{\mu_m}{1+\alpha_m\left(1-\frac{c_v}{c_w}\right)(m-1)}.$$

Совершенно аналогично рассчитываются формулы для эффективных модулей упругости всего композита, образованного матрицей W_m и скоплениями W_f. Макроскопический закон Гука в этом случае имеет вид

$$\langle s_{ij}\rangle = 2\mu^* \langle e_{ij}\rangle - 2\mu^\alpha \langle \alpha_{ij}\rangle, \qquad \langle \sigma_{pp}\rangle = 3K^* \langle \varepsilon_{pp}\rangle. \tag{1.8}$$

Здесь

$$\begin{aligned} \mu^* &= \mu_m \left[1 + \frac{c_w(\mu_w-\mu_m)}{\mu_m + \alpha_m(1-c_w)(\mu_w-\mu_m)}\right], \\ K^* &= K_m \left[1 + \frac{c_w(K_w-K_m)}{K_m + \gamma_m(1-c_w)(K_w-K_m)}\right]. \end{aligned} \tag{1.9}$$

Для определения макроскопических условий прямого и обратного фазовых превращений в рассматриваемой среде и закона ее деформирования необходимо усреднить соотношения (2) по объему новой фазы V_2

$$\langle s_{ij} - 2n_{+,-}(\alpha)\alpha_{ij}\rangle_f \langle s_{ij} - 2n_{+,-}(\alpha)\alpha_{ij}\rangle_f = k_{+,-}^2\left(\langle\alpha\rangle_f\right). \tag{1.10}$$

Постановка в условие (1.10) локального закона Гука (1.3) и применение правила механического смешивания дают макроскопические поверхности нагружения

$$\begin{aligned} \left[\langle s_{ij}\rangle - 2n_{+,-}^*\left(\langle\alpha\rangle_f\right)\langle\alpha_{ij}\rangle_f\right]\left[\langle s_{ij}\rangle - 2n_{+,-}^*\left(\langle\alpha\rangle_f\right)\langle\alpha_{ij}\rangle_f\right] = \\ = k_{+,-}^{*2}\left(\langle\alpha\rangle_f\right) \end{aligned} \tag{1.11}$$

и ассоциированный с ней закон деформирования

$$\langle s_{ij}\rangle = k_{+,-}^*\left(\langle\alpha\rangle_f\right) v_{ij} + 2n_{+,-}^*\left(\langle\alpha\rangle_f\right)\langle\alpha_{ij}\rangle_f, \quad v_{ij} = \frac{\left\langle \overset{\bullet}{\alpha}_{ij}\right\rangle}{\sqrt{\left\langle\overset{\bullet}{\alpha}_{kl}\right\rangle\left\langle\overset{\bullet}{\alpha}_{kl}\right\rangle}}. \tag{1.12}$$

Здесь

$$k_{+,-}^* = \frac{k_{+,-}\left(\langle\alpha\rangle_f\right)}{m}\left(1 + \left(\alpha_m\left(1-\frac{c_v}{c_w}\right) + \frac{c_v}{c_w}\right)(m-1)\right)$$

— эффективный начальный предел фазового перехода,

$$n_{+,-}^* = n_{+,-}\left(\langle\alpha\rangle_f\right) + \mu^*\left(\frac{k_{+,-}^*\left(\langle\alpha\rangle_f\right)}{k_{+,-}\left(\langle\alpha\rangle_f\right)c_v}\left(1 - \left(1-\frac{c_v}{c_w}\right)\alpha_m\right) - 1\right)$$

— эффективный коэффициент упрочнения, характеризующий скорость перемещения поверхности (1.9) в шестимерном пространстве макронапряжений.

Структурные средние деформации $\langle\alpha_{ij}\rangle_f$ необходимо выразить через объемное содержание новой фазы c_v и величину $\alpha_{\max}$.

Процесс фазового перехода может быть описан кинетическим уравнением [2]

$$\begin{gathered}\frac{d\alpha}{dc_v} = h(1-\alpha)^{\lambda} c_v \quad (0 \leqslant \lambda \leqslant 1), \\ c_v\big|_{\alpha=0} = 0, \qquad c_v\big|_{\alpha=\alpha_{\max}} = c_w.\end{gathered} \tag{1.13}$$

Из уравнения (1.13) находим зависимость роста уровня структурных деформаций от концентрации новой фазы

$$\frac{\alpha}{\alpha_{\max}} = 1 - \left(1 - c_v^2\right)^{\frac{1}{1-\lambda}} \tag{1.14}$$

или

$$c_v = \sqrt{1 - \left(\frac{\alpha}{\alpha_{\max}} - 1\right)^{1-\lambda}}. \tag{1.15}$$

Параметр роста λ остается постоянным на протяжении всего процесса фазового перехода, и его значение может быть измерено на границе упругого поведения и нелинейного упрочнения нестабильной среды. Затем это значение λ используется в уравнениях (1.12) во всем диапазоне развития структурных деформаций $0 \leqslant \alpha \leqslant \alpha_{\max}$.

Соотношение (1.10) принимает вид

$$\langle s_{ij} \rangle = \left(k^*_{+,-} + 2n^*_{+,-}\alpha_{\max}\left(1 - (1 - c_v)^{\frac{1}{1-\lambda}}\right)\right) v_{ij}. \tag{1.16}$$

2. Эффективные свойства среды со скоплениями зародышей фаз в виде взаимопроникающих объемов

Пусть теперь фазовая структура представляет собой двухкомпонентную среду, в которой матрица и объемы скоплений образуют взаимопроникающие каркасы, а каждый элемент скоплений включений в свою очередь представляет собой двухкомпонентный композит с равномерным распределением зародышей новой фазы.

В этом случае описанная выше процедура расчета эффективных характеристик приводит к макроскопическому закону Гука вида (1.8), в котором

$$\begin{gathered}\mu^* = \langle \mu \rangle \left(1 + \frac{\alpha c_w c_m (\mu_w - \mu_m)^2}{\langle \mu \rangle - \alpha (c_w - c_m)(\mu_w - \mu_m)}\right), \\ K^* = \langle K \rangle \left(1 + \frac{\gamma c_w c_m (K_w - K_m)^2}{\langle K \rangle - \gamma (c_w - c_m)(K_w - K_m)}\right), \\ \langle \mu \rangle = c_w \mu_w + c_m \mu_m, \qquad \alpha = \frac{2}{15}\frac{4 - 5\langle v \rangle}{1 - \langle v \rangle}, \\ \langle K \rangle = c_w K_w + c_m K_m, \qquad \gamma = \frac{1}{15}\frac{1 + \langle v \rangle}{1 - \langle v \rangle}.\end{gathered} \tag{2.1}$$

Макроскопические условия прямого и обратного фазовых переходов имеют вид (1.12), в которых

$$k^*_{+,-} = k_{+,-}\left(\langle\alpha\rangle_f\right)\frac{\mu^*}{\mu^\alpha} \tag{2.2}$$

— эффективный начальный предел фазового перехода,

$$\begin{gathered} n^*_{+,-} = n_{+,-}\left(\langle\alpha\rangle_f\right)\frac{k^*_{+,-}\left(\langle\alpha\rangle_f\right)}{k_{+,-}\left(\langle\alpha\rangle_f\right)}\times \\ \times\left(\mu_m + n_{+,-}\left(\langle\alpha\rangle_f\right) + \mu_m\frac{\alpha c_w\mu_m}{\langle\mu\rangle - \alpha\left(\mu_w - \mu_m\right)\left(c_m - c_w\right)}\right) - \mu^\alpha_w c_m \end{gathered} \tag{2.3}$$

— эффективный коэффициент упрочнения.

Связь структурных средних деформаций $\langle\alpha_{ij}\rangle_f$ с объемным содержанием новой фазы c_v и величиной $\alpha_{\max}$ выражается соотношением (1.15), а макроскопический закон упрочнения рассматриваемой среды имеет вид (1.12) с эффективными параметрами (2.2), (2.3).

Литература

[1] Сараев, Л.А. Неупругие свойства многокомпонентных композитов со случайной структурой / Л.А. Сараев, В.С. Глущенков. — Самара: Изд-во Самарского гос. университета, 2004. — 164 с.

[2] Мантуленко, А.В. К теории нелинейного упрочнения нестабильных неравномерно распределенных фазовых структур / А.В. Мантуленко, А.Л. Сараев, Л.А. Сараев // Труды XI международного симпозиума "Упорядочение в минералах и сплавах", 10–15 сентября 2008 г., Ростов-на-Дону. — Ростов н/Д., 2008. — Т. 2. — С. 160–163.

Поступила в редакцию 9/*II*/2009;
в окончательном варианте — 9/*II*/2009.

NONLINEAR HARDENING OF NON-UNIFORMLY DISTRIBUTED UNSTABLE PHASE STRUCTURES

© 2009 V.O. Levchenko, A.V. Mantulenko, A.L. Saraev[2]

In the article mathematical models of process of the phase changes in unstable elastic medium, the elements of phase structure of which are formed and distributed in space non-uniformly are constructed. Two types of structures are considered. In the first case new phase forms accumulations in the form of separate inclusions. In the second case new and old phases form accumulations in the form of interpenetrating skeletons. Statistical averaging of nonlinear systems of equilibrium equations of nonuniformly distributed micro heterogeneity environments with unstable components allows to establish their macroscopically determining equations and calculate appropriate effective characteristics.

Key words and phrases: determining equations, phase changes, effective characteristics, micro structure, statistical averaging.

Paper received 9/*II*/2009.
Paper accepted 9/*II*/2009.

[2]Levchenko Vadim Olegovich (ssumonk@yandex.ru), Mantulenko Alexey Vyacheslavovich (mantulenko83@mail.ru), Saraev Alexander Leonidovich (alex_saraev@mail.ru), Dept. of Mathematics, Computer Science and Mathematical Methods in the Economy, Samara State University, Samara, 443011, Russia.