

СТАТИСТИЧЕСКИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ НАПРЯЖЕНИЙ В ПОЛИКРИСТАЛЛАХ

Ашихмин В.Н., Повышев И.А. (Пермь)

Abstract

Statistical properties of stress are determined with use imitation model. The model is based on finite-element automat. The statistical criterion for determination size represent volume of metals is received.

Традиционно [1] моделирование поведения металла ведется для трех структурных уровней (рис.1).

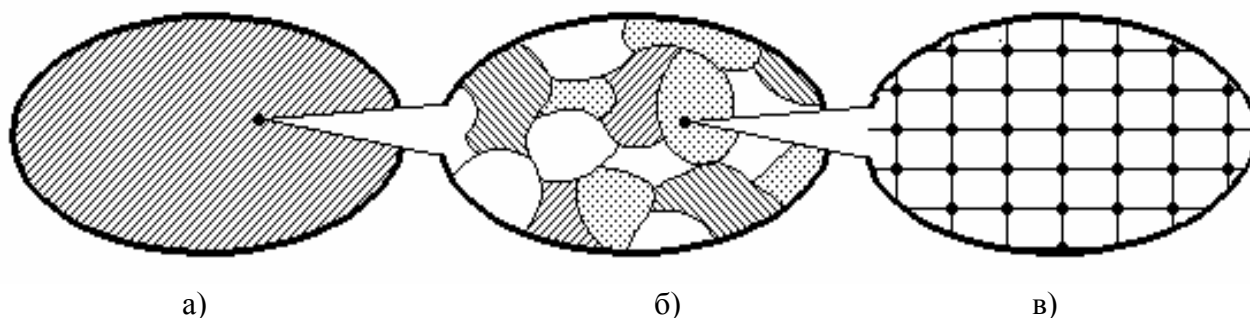


Рис.1. Три структурных уровня металла:

- а) макроуровень - инженерные модели (модель сплошной среды);
- б) мезоуровень - инженерно-физические модели;
- в) микроуровень - физические модели

При построении определяющих соотношений для соответствующего структурного уровня вводится понятие представительного объема или элементарной ячейки, т.е. такого минимального объема материала, для которого справедливы принимаемые определяющие соотношения. Например, для классических макромоделей свойства металла после отжига принимаются однородными и изотропными. Представительный объем в этом случае выбирается так, чтобы можно было заменить реальный металл с неоднородным зернистым строением некоторым эквивалентным однородным материалом с эффективными свойствами. Представительный объем для мезоуровня необходимо ввести так, чтобы можно было не учитывать влияние каждого атома, а рассматривать эквивалентный данному кристаллу однородный анизотропный материал.

Для каждого структурного уровня можно ввести свои параметры состояния: напряжения и деформации. При этом параметры макроуровня можно рассматривать как результат осреднения соответствующих параметров мезоуровня. Например, связь между

макронапряжениями $\tilde{\sigma}$ и мезонапряжениями $\tilde{\alpha}$ может быть записана через операцию осреднения [2] по представительному объему V следующим образом:

$$\tilde{\sigma} = \langle \tilde{\alpha} \rangle_V = \frac{1}{V} \int_V \tilde{\alpha}(\bar{x}) dV. \quad (1)$$

Целью данной работы является изучение с помощью соответствующей математической модели статистических параметров распределения мезонапряжений $\tilde{\alpha}$ в различных поликристаллах и неоднородных материалах, а также эффективного напряжения $\langle \tilde{\alpha} \rangle_V$ в зависимости от величины объема осреднения V .

Определение мезонапряжений будем выполнять с помощью конечно-элементного автомата, под которым будем понимать математическую модель, предназначенную для исследования поведения материала под действием однородных (т.е. не меняющихся вдоль сторон) нагрузок. Рассмотрим плоский упругий конечно-элементный автомат, для исследования материала в условиях плоско-деформированного состояния.

Исследуемая среда занимает квадратную область $\bar{\Omega}$ (рис.2) с границей $B = \bigcup_{i=1}^4 B_i$, ($\bar{\Omega} = \Omega \cup B$). Область $\bar{\Omega}$ разбивается на n квадратных ячеек Ω_i ($i=1,2,\dots,n$) (соответственно, сторона области разбивается на m равных отрезков: $n=m^2$). В пределах ячейки Ω_i свойства материала принимаются однородными. По сторонам области Ω задаются однородные граничные условия. Напряженно- деформированное состояние в любой ячейке Ω_i удовлетворяет:

уравнениям равновесия

$$\bar{\nabla} \cdot \tilde{\alpha} = 0, \bar{x} \in \Omega_i, \quad (2)$$

определяющим уравнениям

$$\tilde{\alpha} = \tilde{C} \cdot \tilde{\beta}, \bar{x} \in \bar{\Omega}_i, \quad (3)$$

геометрическим соотношениям

$$\tilde{\beta} = \frac{1}{2} (\bar{\nabla} \tilde{u} + \bar{\nabla} \tilde{u}^T), \bar{x} \in \bar{\Omega}_i, \quad (4)$$

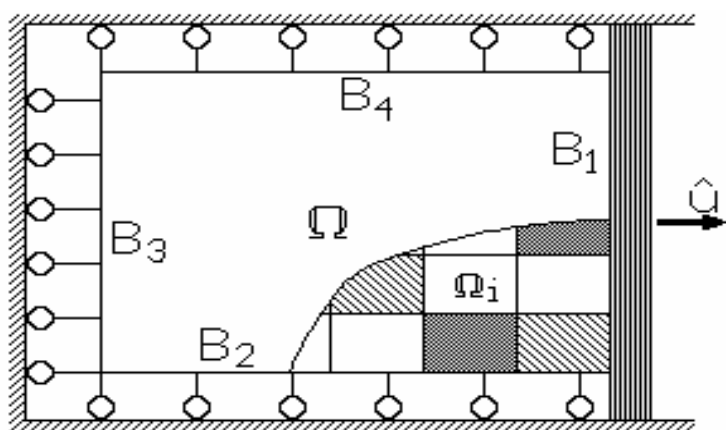


Рис.2. Схема нагружения

где $\tilde{\alpha}$ - тензор мезонапряжений, $\tilde{\beta}$ - тензор мезодеформаций, \tilde{C} - тензор модулей упругости материала, \tilde{u} - вектор перемещений. Граничные условия на B :

- а) $\bar{x} \in B_1 : u_x = \hat{u}, u_y = 0$;
- б) $\bar{x} \in B_2 \cup B_4 : \alpha_{xy} = 0, u_y = 0$;
- в) $\bar{x} \in B_3 : \alpha_{xy} = 0, u_x = 0$.

Численная реализация алгоритма проводилась с

помощью метода конечных элементов. Все расчеты проводились для области единичного размера при $m=30$, т.е. объем получаемых выборок для оценки статистических параметров

составлял 900 элементов. Для сопоставимости статистических параметров для различных материалов использовались относительные мезонапряжения:

$$\tilde{\alpha}^* = \frac{\tilde{\alpha}}{\frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \tilde{\alpha}(\bar{x}) d\Omega} \quad (5)$$

Были исследованы однофазные металлы с кубическим типом решетки. Для характеристики степени анизотропии кристалла использовался параметр анизотропии [3]

$$A = \frac{2C_{44}}{C_{11} - C_{12}}, \quad (6)$$

который для изотропного материала равен единице. В табл.1 приведены данные о модулях упругости и параметре анизотропии исследованных материалов. Принимался равномерный закон распределения кристаллографических осей материала по объемам Ω_i .

Обработка полученных в результате решения краевых задач выборок $\tilde{\alpha}^*$ показала, что гипотеза о нормальном законе распределения компонент α_{ij}^* может быть принята с уровнем значимости 90%. Математическое ожидание $\tilde{M} = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \tilde{\alpha}^*(\bar{x}) d\Omega$ принимало единичное значение.

Таблица 1.

Название материала	Модули упругости, кбар			A	Среднеквадратическое отклонение		
	C ₁₁	C ₁₂	C ₄₄		S(α_{xx}^*)	S(α_{yy}^*)	S(α_{xy}^*)
Натрий	74	62	42	7.00	16.46	26.39	3.07
Медь	1684	1214	754	3.21	3.66	6.09	26.04
Тантал	2650	1590	831	1.57	0.56	1.43	28.58
Алюминий	1073	609	283	1.22	0.12	0.50	9.37

В качестве характеристики разброса α_{ij}^* определялась величина среднеквадратического отклонения

$$s(\tilde{\alpha}^*) = \sqrt{\frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} (\tilde{\alpha}^* - \tilde{M})^2 d\Omega}, \quad (7)$$

значения которого для компонент относительных мезонапряжений приведены в табл.1. Как видно из приведенных результатов, чем выше коэффициент анизотропии, тем более неоднородным является поле нормальных компонент мезонапряжений. Данные результаты хорошо совпадают с результатами работы [4].

Исследование зависимости степени разброса эффективного напряжения $\langle \tilde{\alpha}^* \rangle_V$ от величины объема осреднения V выполнялось следующим образом. В качестве области осреднения выбирался квадрат размером m на m ячеек. Последовательным смещением выбранного квадрата по области Ω на одну ячейку по горизонтали или вертикали получали выборку из K объемов осреднения. В данном случае принимали K=100. Затем находили среднее для каждого V_i эффективное напряжение

$$\langle \tilde{\alpha}^* \rangle_i = \frac{1}{\eta} \sum_{j=1}^{\eta} \tilde{\alpha}_{j'}^*, \quad \text{где } \eta = m^2, i = 1..K. \quad (8)$$

Обработывая выборку из $\langle \tilde{\alpha}^* \rangle_i$, определяли математическое ожидание и дисперсию:

$$M(\langle \tilde{\alpha}^* \rangle) = \frac{1}{K} \sum_{j=1}^K \langle \tilde{\alpha}^* \rangle_j, D(\langle \tilde{\alpha}^* \rangle) = \frac{1}{K} \sum_{j=1}^K \left(\langle \tilde{\alpha}^* \rangle_j - M(\langle \tilde{\alpha}^* \rangle) \right)^2. \quad (9)$$

С точки зрения математической статистики задачу определения дисперсии $D(\langle \tilde{\alpha}^* \rangle)$ можно сформулировать следующим образом. Имеется выборка n (не обязательно независимых) случайных величин $\tilde{\alpha}_1^*, \tilde{\alpha}_2^*, \dots, \tilde{\alpha}_n^*$ с математическим ожиданием μ и дисперсией S^2 . Из данной выборки случайным образом выделяется K подвыборок объемом по η элементов и находится среднее $\langle \tilde{\alpha}^* \rangle$ по каждой подвыборке. Требуется определить математическое ожидание и дисперсию найденного среднего $\langle \tilde{\alpha}^* \rangle$. Из свойств математического ожидания и дисперсии можно записать:

$$M(\langle \tilde{\alpha}^* \rangle) = M\left(\frac{1}{\eta} \sum_{j=1}^{\eta} \tilde{\alpha}^*_{j}\right) = \frac{1}{\eta} \sum_{j=1}^{\eta} M(\tilde{\alpha}^*_{j}) = \mu, \quad (10)$$

$$D(\langle \tilde{\alpha}^* \rangle) = D\left(\frac{1}{\eta} \sum_{j=1}^{\eta} \tilde{\alpha}^*_{j}\right) = \frac{1}{\eta^2} D\left(\sum_{j=1}^{\eta} \tilde{\alpha}^*_{j}\right).$$

Для дисперсии суммы случайных величин имеем[6]:

$$D\left(\sum_{j=1}^{\eta} \tilde{\alpha}^*_{j}\right) = \sum_{i=1}^{\eta} \sum_{j=1}^{\eta} \rho_{ij} S_i S_j,$$

где ρ_{ij} - коэффициент корреляции между элементами $\tilde{\alpha}^*_i$ и $\tilde{\alpha}^*_j$, выражаемый через ковариацию λ_{ij} :

$$\rho_{ij} = \rho_{ji} = \frac{\lambda_{ij}}{\sqrt{\lambda_{ii} \lambda_{jj}}}, \rho_{ii} = 1, \text{ где } \lambda_{ij} = \lambda_{ji} = M\left[(\tilde{\alpha}^*_i - M(\tilde{\alpha}^*_i))(\tilde{\alpha}^*_j - M(\tilde{\alpha}^*_j))\right];$$

S_i и S_j - среднеквадратические отклонения элементов $\tilde{\alpha}^*_i$ и $\tilde{\alpha}^*_j$, равные в данном случае S . Учитывая симметрию матрицы моментов ρ_{ij} , дисперсию $\langle \tilde{\alpha}^* \rangle$ можно окончательно представить в следующем виде:

$$D(\langle \tilde{\alpha}^* \rangle) = \frac{S^2}{\eta^2} \left(\eta + 2 \sum_{i=1}^{\eta-1} \sum_{j=i+1}^{\eta} \rho_{ij} \right), \quad (11)$$

Если величины $\tilde{\alpha}^*_1, \tilde{\alpha}^*_2, \dots, \tilde{\alpha}^*_n$ независимы, то $\rho_{ij} = 0$ при $i \neq j$. В этом случае

$$D(\langle \tilde{\alpha}^* \rangle) = \frac{S^2}{\eta}. \quad (12)$$

Величина ρ_{ij} по модулю не превышает 1, поэтому для дисперсии эффективных напряжений получаем следующее ограничение:

$$0 \leq D(\langle \tilde{\alpha}^* \rangle) \leq S^2. \quad (13)$$

Таким образом, из ограничения (13) следует, что в результате осреднения α_{ij}^* по объему V величина дисперсии $\langle \tilde{\alpha}^* \rangle$ не может превосходить дисперсию мезонапряжений. Если ввести понятие относительной дисперсии эффективных напряжений в виде

$$D^* = \frac{D(\langle \tilde{\alpha}^* \rangle)}{s^2}, \quad (14)$$

то можно сравнить для различных материалов зависимость D^* от величины объема осреднения мезонапряжений. При этом, по близости $D^*(m)$ к функции $1/\eta$ можно будет судить о независимости мезонапряжений.

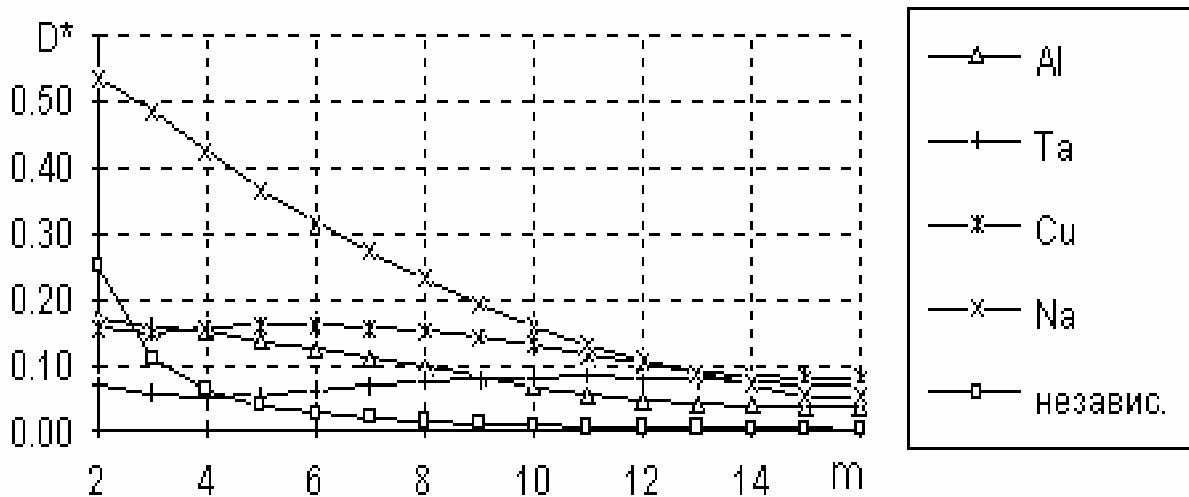


Рис.3. Зависимость $D^*(m)$

На рис.3 для рассмотренных выше металлов представлены зависимости $D^*(m)$. Как можно видеть из приведенных результатов, величина относительной дисперсии при увеличении объема осреднения стремится к зависимости $1/\eta$. Данное обстоятельство позволяет сделать следующие выводы:

1. С увеличением области осреднения дисперсия $\langle \tilde{\alpha}^* \rangle$ уменьшается, т.е. уменьшается случайность эффективных напряжений. Если задаться малой положительной величиной δ и условиться, что при снижении дисперсии $\langle \tilde{\alpha}^* \rangle$ ниже выбранной δ последние можно считать дисперсными (т.е. не случайными), то для любого материала можно подобрать такой объем осреднения V , при котором будет выполняться ограничение

$$D^*(\langle \tilde{\alpha}^* \rangle) \leq \delta. \quad (15)$$

2. Так как $D^*(m)$ при увеличении m стремится к $1/\eta$, то можно сделать вывод, что зависимость напряженного состояния в данной точке от напряжений в соседних убывает с увеличением расстояния между точками, т.е. чем точки дальше друг от друга, тем их состояния менее коррелированы друг с другом. Аналогично δ можно ввести малую положительную величину ε , являющуюся мерой независимости состояний в двух точках тела. Если принять, что ε равно δ , то условие (15) может служить критерием независимости напряженных состояний.

В работе [2] экспериментально исследована зависимость мезонапряжений в соседних точках. Показано, что в однофазных поликристаллах закон распределения мезонапряжений близок к нормальному. Поэтому для выяснения вопроса о независимости напряжений строились функции корреляции. Было установлено, что на расстоянии 4-5 средних диаметров зерна для алюминия и 6-7 средних диаметров для меди напряженно-деформированное состояние практически некоррелировано. Аналогичные выводы были сделаны в работах [4,5]. Расстояние, на котором напряженно-деформированное состояние в зернах можно считать независимым, предлагалось выбирать в качестве размера представительного объема на макроуровне. В этом случае, если взять представительный объем в виде куба, то для алюминия в нем должно содержаться более 50 зерен, а для меди - более 200. Для рассмотренного в данной работе плоского конечно-элементного автомата это соответствует разбиению 7 на 7 для алюминия и 14 на 14 для меди. Как можно видеть из рис.3, величины относительных дисперсий для данных материалов при соответствующих m близки друг к другу и равны примерно 0.1. Данное обстоятельство позволяет сделать вывод, что δ в критерии (15) можно выбрать равным 0.1.

Вторая серия численных экспериментов с конечноэлементным автоматом была посвящена исследованию статистических свойств представительного объема для изотропных неоднородных материалов, состоящих из двух фаз. В табл.2 приведены свойства фаз, отличающиеся значениями модуля C_{11} (для изотропного материала $C_{44}=(C_{11}-C_{12})/2$). В качестве характеристики материала использовался коэффициент неоднородности:

$$K = C_{11}^{(2)} / C_{11}^{(1)}. \quad (16)$$

Таблица 2

Номер фазы	Модули упругости, кбар			K	S($\tilde{\alpha}$) при 50% 2-й фазы		
	C ₁₁	C ₁₂	C ₄₄		S(α_{xx})	S(α_{yy})	S(α_{xy})
1	100	60	20	-	-	-	-
2	300	60	120	3	0.17	0.38	127.16
2	600	60	270	6	0.32	0.78	93.68
2	1000	60	470	10	0.39	1.23	23.14

Получаемый закон распределения мезонапряжений существенно зависит как от процентного содержания второй фазы, так и от граничных условий на стороне V_1 . При малом содержании одной из фаз и задании на V_1 граничного условия в перемещениях деформация осуществляется в основном за счет той фазы, объемная доля которой больше. В этом случае наибольший разброс напряжений наблюдается при примерно равном содержании фаз. Если на V_1 задать усилия, то наибольший разброс будет наблюдаться, если доля одной из фаз составляет примерно 10%. Кроме того, в этом случае получаемая выборка напряжений является не унимодальной, т.е. содержит 2 или даже 3 горба. Последнее обстоятельство можно объяснить резким разделением значений деформации жестких включений, прилегающих к ним областей и мягкой матрицы.

Влияние коэффициента неоднородности и процентного содержания второй фазы на величину среднеквадратического отклонения $S(\alpha_{xx})$ показано на рис.4,а. Наибольший разброс наблюдается, если доля второй фазы составляет 50%. В табл.2 для 50%-ного содержания фаз приведены значения $S(\tilde{\alpha})$, которые показывают, что с ростом

коэффициента неоднородности материала величина среднеквадратического отклонения увеличивается.

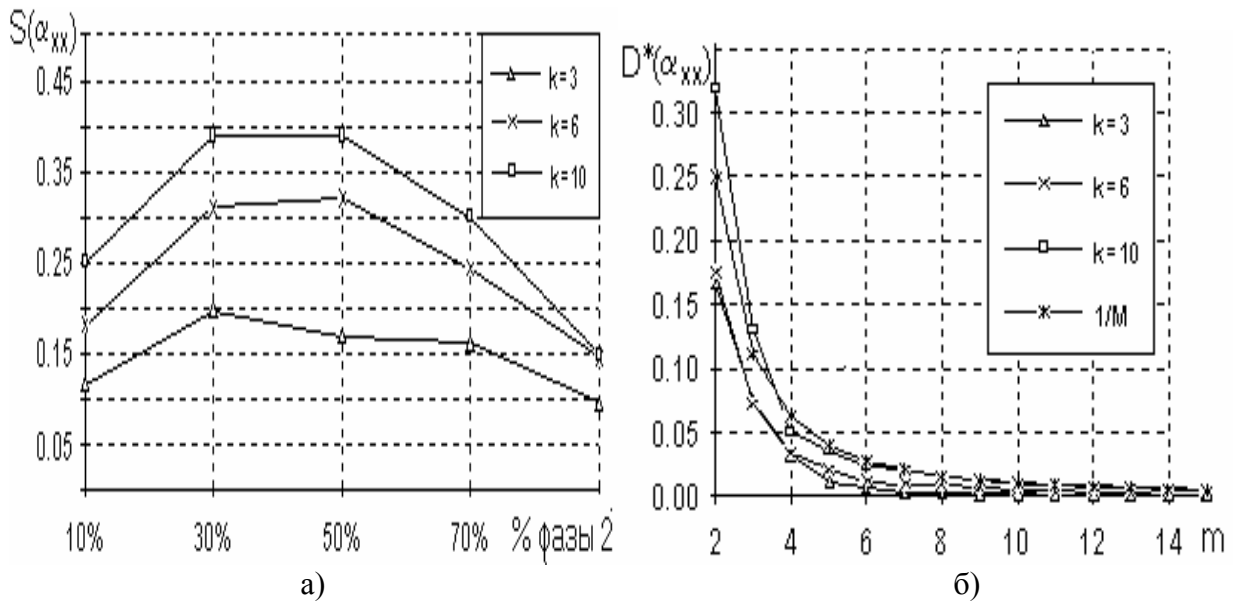


Рис.4. Влияние коэффициента неоднородности и процентного содержания на $S(\alpha_{xx})$

Зависимость относительной дисперсии $D^*(\alpha_{xx})$ от величины объема осреднения m и от коэффициента неоднородности показана на рис.4,б. Приведенные результаты позволяют сделать вывод, что для подобной модели неоднородного материала зависимость относительной дисперсии от объема осреднения убывает практически обратно пропорционально числу элементов осреднения, т.е. напряженно-деформированное состояние в соседних ячейках слабо зависит друг от друга.

Итак, проведенные численные эксперименты и сравнение с экспериментальными результатами показали, что полученное соотношение (15) можно использовать в качестве критерия для определения размеров представительного объема. Данный критерий имеет следующие преимущества перед критерием [2], использующим функцию корреляции.

Во-первых, соотношение (15) применимо как для случайных величин, распределенных по нормальному закону, так и для случайных величин, имеющих произвольное распределение.

Во-вторых, данный критерий менее трудоемок в применении, т.к. получить и обработать выборку эффективных напряжений намного проще и быстрее, чем построить корреляционную функцию.

Авторы выражают свою благодарность к.т.н. М.Б.Гитману и проф. П.В.Трусову за участие в обсуждении данной работы и высказанные ими ценные замечания.

Литература

1. Биргер И.А., Мавлютов Р.Р. Сопротивление материалов: Учебное пособие.- М.: Наука, 1986. - 560с.
2. Богачев И.Н., Вайнштейн А.А., Волков С.Д. Статистическое металловедение.- М.: Metallurgia, 1984. - 176с.
3. Лившиц Б.Г., Крапошин В.С., Линецкий Я.Л. Физические свойства металлов и сплавов.- М.: Metallurgia, 1980. - 320с.
4. Кукса Л.В., Эльманович В.И. Применение МКЭ к исследованию микронеоднородности упругих напряжений и деформаций в поликристаллах //Проблемы прочности.- 1979. №7.- С.70-75.
5. Ломакин В.А., Кукса Л.В., Бахтин Ю.Н. Масштабный эффект упругих свойств поликристаллических материалов //Прикл.мех.- 1982. Т.18, №9.- С.10-15
6. Айвазян С.А., Енюков И.С., Мешалкин Л.Д. Прикладная статистика: Основы моделирования и первичная обработка данных: Справочное изд. - М.: Финансы и статистика, 1983. - 471с.