

## **Исследование деформационных процессов на поверхности и в объеме материалов с внутренними границами раздела методами численного моделирования**

В.А. Романова

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, 634021, Россия

В работе проведено моделирование в трехмерной постановке поведения структурно-неоднородных материалов поликристаллического и композиционного типов в условиях квазистатического растяжения. Для введения в расчеты структуры мезоскопического масштаба (зерна, включения) применена процедура генерации структур поликристаллического и композиционного типов, сходных с экспериментальными по количественным и качественным характеристикам. На основе концепций физической мезомеханики проведен анализ напряженно-деформированного состояния в объеме и на поверхности исследуемых материалов. Исследовано напряженно-деформированное состояние в различных сечениях мезообъемов и эволюция пластической деформации на начальных стадиях пластического течения. На основе результатов моделирования сделаны выводы относительно особенностей пластической деформации в трехмерных структурах на мезо- и макроуровнях. На примере композиционной структуры исследован вопрос о степени соответствия двумерных и трехмерных моделей на мезоуровне в случае явного учета мезоструктуры. Для этого проведен сравнительный анализ трехмерных и двумерных расчетов в постановке плоской деформации и плоского напряженного состояния.

## **Investigation of deformation processes on the surface and in the bulk of materials with internal interfaces by numerical simulation methods**

V.A. Romanova

Institute of Strength Physics and Materials Science SB RAS, Tomsk, 634021, Russia

The paper represents the 3D simulation of the behavior of heterogeneous polycrystalline and composite materials in the conditions of quasi-static tension. To introduce the mesoscale structures (grains, inclusions) into the calculation, use is made of the procedure to generate polycrystalline and composite structures that are similar to the experimental ones in quantitative and qualitative characteristics. Based on the concepts of physical mesomechanics the stress-strain state in the bulk and on the surface of the studied materials is analyzed. The stress-strain state in different mesovolume sections and plastic deformation evolution on the initial stages of plastic flow are studied. With the simulation results inferences are made about the peculiarities of plastic deformation in 3D structures on the meso- and macrolevels. Using the composite structure as an example, consideration is given to the correlation of 2D and 3D models on the mesolevel if the mesostructure is taken into account explicitly. For this purpose a comparative analysis of 3D and 2D calculations is performed in the conditions of plane deformation and plane stress state.

### **1. Введение**

С точки зрения современной механики и физики конденсированных сред, внутренняя структура материала существенно влияет на его поведение под нагрузкой [1–8]. Экспериментальные и теоретические исследования свидетельствуют о ключевой роли внутренней структуры в процессах образования концентраторов напряжений, локализации пластической деформации и релаксационных процессах в деформируемом материале. Информация о поведении материалов на разных масштабных уровнях является крайне важной для оценки надежности, долговечности и эксплуатационной способности деталей и различных элементов конструкций, а также для создания новых материалов и технологий.

Одним из наиболее перспективных направлений современного материаловедения является создание композиционных материалов, обладающих высокими прочностными характеристиками. Существенно неоднородная внутренняя структура композитов делает задачу исследования поведения этих материалов на разных масштабных уровнях еще более острой.

Большинство экспериментальных методик [1, 3–10] сводятся к исследованиям *in situ* поверхности образцов в процессе деформирования или внутренней структуры после снятия нагрузки. Такие методики позволяют получать лишь косвенные данные о механизмах деформации и эволюции внутренней структуры материала в условиях активного нагружения. В связи с этим в до-

полнение к экспериментам важным инструментом исследования поведения материалов под нагрузкой являются теоретические исследования и, в частности, численное моделирование деформационных процессов на разных масштабных уровнях с учетом внутренней неоднородности.

В работах [11, 12] авторами был предложен подход к описанию поведения структурно-неоднородных материалов, предполагающий явное введение в расчеты исходной трехмерной структуры. Для генерации структур различного типа была предложена процедура пошагового заполнения дискретного пространства объемными структурными элементами (step-by-step packing (SSP) method). С помощью разработанного метода были сгенерированы поликристаллические и композиционные структуры, механическое поведение которых затем исследовалось методом численного эксперимента.

В рамках настоящей работы представлены результаты моделирования квазистатического растяжения поликристаллической и композиционной структур. Предложенный подход применяется для моделирования и анализа напряженно-деформированного состояния в объеме и на поверхности трехмерных структур поликристаллического алюминия и металлокерамического композита Al/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. С использованием SSP-метода [11, 12] строится модель объемных структур исследуемых материалов.

На основе численных экспериментов проводится анализ эволюции напряженно-деформированного состояния на поверхности и в объеме образцов. Особое внимание уделяется исследованию роли поверхности в процессе зарождения пластических сдвигов.

Наряду с анализом напряженно-деформированного состояния, на примере композиционной структуры исследуется вопрос о границах применимости двумерных моделей в случае моделирования поведения среды на мезоуровне с явным учетом внутренней структуры. Очевидно, что при введении в рассмотрение структурной неоднородности напряженно-деформированное состояние в объеме и на поверхности материала не будет точно соответствовать макроскопическим условиям плоского напряженного состояния или плоской деформации. Для исследования данного вопроса проводится сравнение результатов трехмерных расчетов и их двумерных аналогов в постановках плоской деформации и плоского напряженного состояния.

## 2. Математическое описание среды с явным учетом трехмерной структуры на мезоуровне

### 2.1. Общая система уравнений упругопластической среды в пространственном случае и особенности численной реализации

При построении математической модели поведения сред с внутренней мезоструктурой будем исходить из

предположения о сохранении сплошности среды на мезоуровне в условиях упругопластической деформации. Тогда для описания упругопластических течений на мезоуровне может быть применен математический аппарат механики сплошных сред [13].

В общем случае система уравнений [13], описывающая динамическое поведение сплошной среды для пространственного случая декартовой системы координат, включает:

уравнение движения

$$\rho \dot{U}_i = \sigma_{ij,j}, \quad (1)$$

уравнение неразрывности

$$\frac{\dot{V}}{V} - U_{i,i} = 0, \quad (2)$$

тензор скоростей деформации

$$\dot{\epsilon}_{ij}^T = \frac{1}{2}(U_{i,j} + U_{j,i}) = \dot{\epsilon}_{ij}^e + \dot{\epsilon}_{ij}^p, \quad (3)$$

где  $x_i$  — пространственные координаты;  $U_i = \dot{x}_i$  — компоненты вектора скорости;  $V = \rho_0/\rho$  — удельный относительный объем материала;  $\rho_0$ ,  $\rho$  — начальная и текущая плотности;  $\epsilon_{ij}^T$ ,  $\epsilon_{ij}^e$  и  $\epsilon_{ij}^p$  — компоненты тензоров полной, упругой и пластической деформации, соответственно. Компоненты тензора напряжений  $\sigma_{ij}$  задаются в виде суммы шаровой и девиаторной частей:

$$\sigma_{ij} = -P\delta_{ij} + S_{ij}, \quad (4)$$

где  $P$  — давление;  $S_{ij}$  — компоненты девиатора напряжений;  $\delta_{ij}$  — символы Кронекера. Точка над символом означает производную по времени, запятая после индекса — производную по соответствующей координате, по повторяющимся индексам  $i, j, k = 1, 2, 3$  проводится суммирование.

Для описания шаровой части тензора напряжений используют уравнения состояния различного типа в зависимости от амплитуды давления. Так, например, для описания деформирования в сильных ударных волнах используют уравнение Осборна, задающее связь давления, плотности и внутренней энергии [14].

При динамических нагрузках до 50 ГПа целесообразно использовать кубическое баротропное уравнение [14, 15]:

$$P = A\Theta + B\Theta^2 + C\Theta^3, \quad (5)$$

где  $\Theta = \rho/\rho_0 - 1$  — объемная деформация;  $A$ ,  $B$ ,  $C$  — константы материала. Наконец, при квазистатическом нагружении для определения давления успешно используют линейное уравнение состояния [15, 16]:

$$P = -K\epsilon_{kk}, \quad (6)$$

где  $K$  — модуль объемного сжатия.

Компоненты тензоров девиатора напряжений и девиатора скоростей деформаций в случае упругопластической среды связаны соотношением:

$$\dot{S}_{ij}^* + \lambda S_{ij} = 2\mu \left( \dot{\epsilon}_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \dot{\epsilon}_{kk} \right), \quad (7)$$

где  $\mu$  — модуль сдвига. Скалярный множитель  $\lambda$ , входящий в (7), тождественно равен нулю в упругой области и пропорционален мощности энергии формоизменения в области пластического течения:

$$\lambda = \frac{3\mu}{\sigma_0^2} S_{ij} \left( \dot{\epsilon}_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \dot{\epsilon}_{kk} \right),$$

$\sigma_0$  — макроскопический предел текучести.

Для того чтобы исключить изменение напряженного состояния при вращении отдельных элементов среды как жесткого целого, в (7) вводится параметр  $\dot{S}_{ij}^*$ :

$$\dot{S}_{ij}^* = \dot{S}_{ij} - S_{ik} \omega_{jk} - S_{jk} \omega_{ik}, \quad (8)$$

где  $\omega_{ij} = \frac{1}{2} (U_{i,j} - U_{j,i})$ .

Учет в явном виде внутренней структуры осуществляется через зависимость соответствующих констант материала (плотности, предела текучести, модулей упругости) от координат  $x_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ), при этом уравнения (1)–(8), записанные для континуума, остаются неизменными, т.к. предполагается, что среда сохраняет сплошность, и на границах раздела выполняются условия непрерывности перемещений.

Очевидно, что получить решение системы уравнений (1)–(8) аналитически не представляется возможным. Относительная по сравнению с другими численными методами экономичность в трехмерном случае определила в качестве инструмента для расчетов выбор метода конечных разностей [17, 18].

В предложенных далее примерах расчеты проводились с использованием конечно-разностной схемы, предложенной в [19] для описания одномерных гидродинамических течений в средах с внутренними границами раздела и обобщенной в [17, 18] на трехмерный случай динамического нагружения. Метод построения разностной схемы системы уравнений (1)–(8) основан на представлении частных производных по пространственным переменным поверхностными интегралами и применении теоремы о среднем интегрального исчисления [17].

В работах [11, 12] конечно-разностная схема [17] была модифицирована для описания упругопластической деформации в средах с внутренней мезоструктурой. Отличительной особенностью излагаемого подхода является разбиение расчетной области на кубические ячейки уже на стадии генерации структуры. При введении трехмерной внутренней структуры в расчеты пред-

полагается, что вершины ячеек являются узлами расчетной сетки. Согласно [15–19], координаты и компоненты вектора скорости определяются в узлах расчетной сетки, а физические характеристики материала (плотность, модули упругости, пределы текучести) и компоненты тензоров напряжений и скоростей деформаций считаются постоянными по ячейке и относятся к их геометрическим центрам.

Расчет осуществляется шагами по времени путем перехода от известного состояния на момент времени  $t$  к новому состоянию на момент времени  $t + \Delta t$  и повторяется до тех пор, пока не будет получена картина деформирования на заданном интервале по времени. Причем компоненты вектора скорости и тензора скоростей деформации определяются на промежуточных временных слоях  $n + 1/2$ ,  $n + 3/2$ , ..., а остальные величины вычисляются на целых временных шагах  $n$ ,  $n + 1$ , ... .

Для демпфирования физически нереальных колебаний, связанных с динамической постановкой задачи, а также нефизических искажений сетки (эффект «песочных часов»), свойственных сеткам с прямоугольными ячейками, в расчеты вводилась угловая тензорная вязкость, предложенная в [18]. Следует отметить, что нефизические искажения ячеек, связанные с нескомпенсированными степенями свободы, в случае трехмерных квазистатических задач проявляются наиболее ярко, и, как показали расчеты, использование угловой вязкости оказалось достаточно эффективным для избежания этих эффектов.

## 2.2. Процедура генерации трехмерных структур

Определение зависимости параметров материала от координат, иными словами, введение в модель трехмерной структуры, является в случае трех пространственных переменных далеко нетривиальной задачей. Если в двумерной постановке информацию о распределении структурных элементов в плоском сечении дает обработка экспериментальных металлографических изображений [1, 5–8], то в пространственном случае введение реальной структуры предполагает наличие информации о структурном строении каждого слоя образца, что в принципе является трудно достижимым. Существующие методы послойного сканирования образцов [20, 21], позволяющие получить информацию о распределении структурных элементов в объеме, как правило, сложны и дорогостоящи.

Одним из способов решения данной проблемы является создание модельных структур, соответствующих строению реальных материалов по геометрическим характеристикам структурных элементов (форма, размер, объемная доля, распределение в пространстве и др.).

Задача генерации трехмерной структуры, заполняющей конечный объем элементами определенной формы

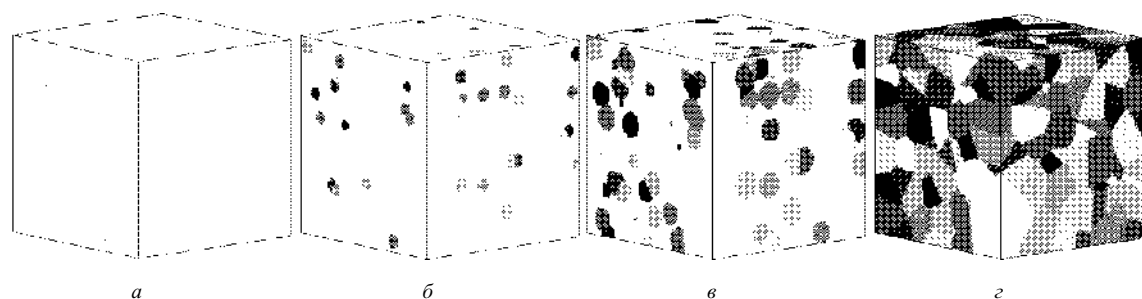


Рис. 1. Трехмерная поликристаллическая структура на разных стадиях процедуры генерации SSP-методом; объемная доля структуры: 0 (а); 10 (б); 50 (в); 100 % (г)

без зазоров и пересечений является актуальной проблемой современной вычислительной механики и физики твердого тела. В литературе описывается целый ряд методов компьютерного моделирования неоднородных структур, включая метод Монте-Карло [22], метод отслеживания вершин [23], метод Вороного–Делоне [24], метод клеточных автоматов [25], фазово-полевые подходы [26] и др. Некоторые из этих методов используют для генерации структур геометрические процедуры, в то время как другие основаны на определенных физических принципах и термодинамических понятиях. Эти методы первоначально были приложены к задаче генерации двумерных структур и имели целью описать с приемлемой точностью кинетику роста и топологические свойства плоской текстуры. В последнее время некоторые из этих методов были успешно применены для моделирования трехмерных структур [26, 27], однако, в большинстве случаев трехмерная реализация была далеко нетривиальной задачей и требовала значительной оптимизации базовых алгоритмов, поскольку требования к объему оперативной памяти и времени вычисления критически возрастали с увеличением пространственной размерности.

В [11, 12] была предложена процедура генерации трехмерных неоднородных структур путем пошагового заполнения конечного объема структурными элементами (в англоязычных источниках [11] *step-by-step packing* (SSP)). Данный метод не подразумевает математическое или имитационное моделирование реального процесса формирования внутренней структуры, основанное на физических и термодинамических формулировках, но, скорее, развитие алгоритмической процедуры получения искусственной структуры на основе анализа реального материала с близкими геометрическими характеристиками. Очевидно, что при такой методике каждый тип структуры требует специального рассмотрения.

Генерация произвольной поликристаллической структуры с использованием SSP-метода проиллюстрирована на рис. 1. В общем случае SSP-процедура включает следующие шаги.

На начальном этапе задаются геометрические параметры расчетной области (включая физические размеры

и форму), которая будет впоследствии заполняться структурными элементами. Заданный объем дискретизируется (т.е. разбивается на конечное число дискретных элементов), и для каждой дискретной точки определяются ее физические координаты.

Каждому дискретному элементу объема присваивается так называемый «структурный индекс»  $SI$  (от английского «structural index»), который указывает на принадлежность данной точки определенному элементу структуры. Первоначально все дискретные элементы имеют нулевой  $SI$ , что подразумевает однородное строение по всему объему. Затем определенным дискретным элементам присваиваются структурные индексы, отличные от нуля. Таким образом, данные точки рассматриваются как центры зарождения новых структурных элементов.

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. Для генерации композиционной структуры, закон распределения зародышей структурных элементов может быть получен на основе экспериментальных данных о распределении включений в матрице готового материала. Таким же образом, на основе экспериментальных данных может быть определен закон, контролирующий рост структурных элементов.

На последнем этапе генерации заданный объем заполняется структурными элементами. На каждом шаге процедуры заполнения задается приращение объема структурных элементов на заданную величину. Величина приращения контролирует скорость роста структурного элемента и тем самым влияет на его конечный размер, в то время как закон роста определяет форму. Скорость и закон роста могут варьироваться для различных структурных элементов. Далее путем перебора для всех дискретных элементов с нулевым структурным индексом проверяется условие попадания их координат в область какого-либо из структурных элементов. В

случае выполнения данного условия дискретной точке присваивается отличный от нуля  $SI$ , указывающий на ее принадлежность соответствующему структурному элементу. В противном случае  $SI$  остается нулевым, и на следующем шаге условие попадания данной точки в область какого-либо структурного элемента проверяется вновь.

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.

### 3. Моделирование поведения поликристаллической структуры при растяжении

#### 3.1. Модель поликристаллического алюминия

Для генерации структуры поликристаллического типа в качестве начальных условий на трехмерной сетке с кубическими ячейками случайным образом распределялись  $N_c$  центров зарождения со структурными индексами, принимающими значения от 1 до  $N_{ph}$ , где  $N_{ph}$  — количество различных элементов структуры. Чтобы избежать слияния зерен и образования вытянутых структурных элементов количество центров зарождения задавалось равным количеству возможных ориентаций зерен:  $N_{ph} = N_c$ . Для всех зерен задавался сферический закон и одинаковая скорость роста.

На каждом шаге  $n$  для всех зерен задавалось приращение радиуса  $R_i^n = R_i^{n-1} + dr_i$ ,  $i = 1, \dots, N_c$ . Затем путем последовательного перебора для всех ячеек с нулевым индексом проверялось условие

$$(X_j - X_i)^2 + (Y_j - Y_i)^2 + (Z_j - Z_i)^2 \leq R_i^2, \quad (9)$$

где  $X_j, Y_j, Z_j$  и  $X_i, Y_i, Z_i$  — координаты  $j$ -й ячейки с  $SI(j) = 0$  и  $i$ -го зерна соответственно. В случае выполнения условия (9)  $j$ -я ячейка присоединяется к  $i$ -му зерну, то есть  $SI(j) = SI(i)$ . Критерием окончания процедуры заполнения является отсутствие в рассматриваемой области ячеек с нулевым структурным индексом. На рис. 1 проиллюстрирована процедура генерации поликристаллической структуры на сетке  $100 \times 100 \times 100$ . В качестве начальных условий в объеме случайным образом были распределены 500 центров зарождения:  $N_{ph} = N_c = 500$ . Несмотря на то, что все зерна росли с одинаковой скоростью в соответствии со сферическим законом, форма и размеры отдельных кристаллитов заметно отличаются между собой. Главным образом, это является результатом неоднородного распределения центров зарождения по объему.

Для ряда поликристаллических структур, сгенерированных с помощью описанной процедуры, был проведен статистический анализ, результаты которого сравнивались в [11, 12] с результатами аналогичного анализа работы [26] и с экспериментальными данными [28].

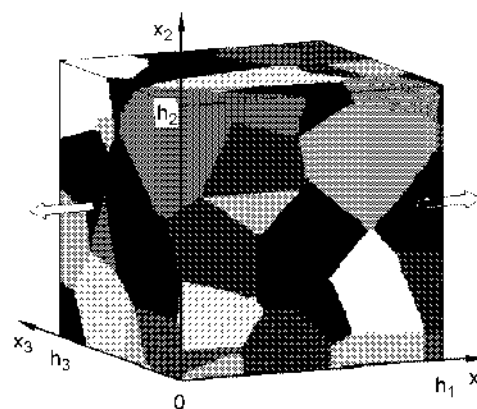


Рис. 2. Схема нагружения поликристаллического образца

Подробный статистический анализ количества граней, поверхностей и размеров зерен проведен в работе [12]. Здесь отметим лишь, что полученные распределения соответствуют распределению Фишера и достаточно хорошо согласуются с экспериментальными данными [20, 28] и результатами моделирования других авторов [26].

На следующем этапе проводился расчет механического поведения дисперсно-упрочненного алюминиевого сплава Al6061-T6, характеризующегося достаточно высоким пределом текучести и ярко выраженной площадкой текучести [29]. Определяющие соотношения задавались уравнениями Прандтля–Рейса (7) для идеальной упругопластической среды. Переход среды из упругого состояния в пластическое определялся критерием текучести Мизеса. Пределы текучести разных зерен отличались от средней величины в пределах 15 %:

$$Y_0^i = \langle Y_0 \rangle \left( 1 + \frac{0.15(N_{ph} - 2i)}{N_{ph}} \right), \quad (10)$$

где  $\langle Y_0 \rangle = 346$  МПа — средний предел текучести;  $i$  изменяется от 1 до  $N_{ph}$ .

#### 3.2. Развитие пластической деформации на поверхности и в объеме поликристалла при растяжении

Граничные условия на поверхностях поликристаллического алюминиевого образца (рис. 2) задавались в виде:

$$\begin{aligned} \sigma_{ij}|_{x_3=0} &= \sigma_{ij}|_{x_3=h_3} = \sigma_{ij}|_{x_2=0} = \sigma_{ij}|_{x_2=h_2} = 0, \\ U_1|_{x_1=0} &= -V_{ten}, \\ U_1|_{x_1=h_1} &= V_{ten}, \end{aligned} \quad (11)$$

где  $h_1, h_2$  и  $h_3$  — длина, высота и толщина образца;  $V_{ten}$  — постоянная скорость.

Проанализируем эволюцию напряженно-деформированного состояния на начальной стадии растяжения.

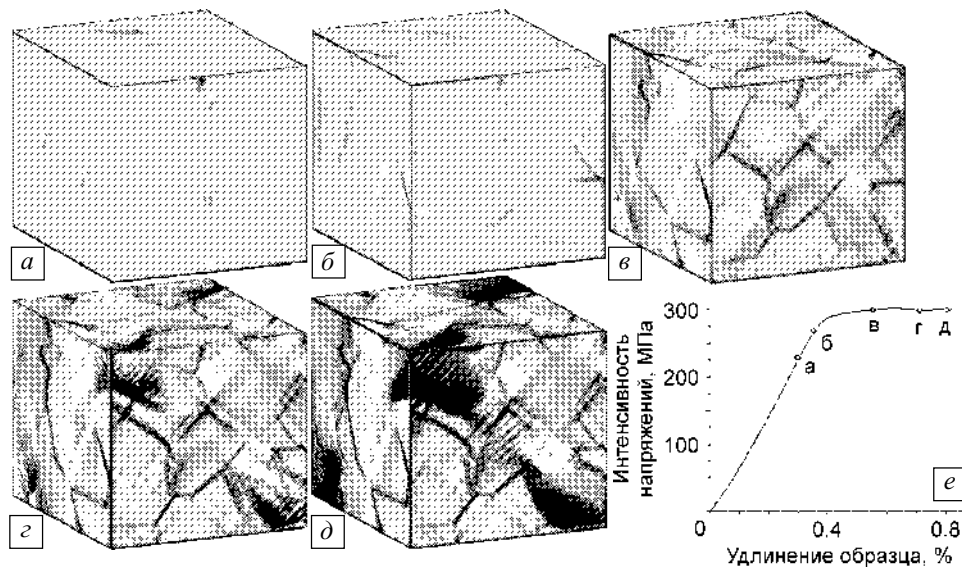


Рис. 3. Рельеф пластической деформации на поверхности на разных стадиях нагружения (а–д) и  $\sigma$  –  $\epsilon$ -диаграмма (е)

На рис. 3 приведены распределения пластической деформации на поверхности образца, соответствующие различным степеням удлинения. Первоначально пластическая деформация зарождается на свободных поверхностях и затем постепенно охватывает внутренние области. Зарождение пластической деформации в локальных областях поверхности объясняется более высокой интенсивностью напряжений на поверхности по сравнению с уровнем интенсивности напряжений в объеме.

Известно, что на макроскопическом уровне мощными концентраторами напряжений являются геометрические особенности образца, в частности, угловые точки, выемки и вырезы, свободные поверхности. Как отмечается в ряде работ [2–10], поверхность образца, в силу своих геометрических и физических особенностей, является областью концентрации напряжений. В [12] мы показали, что в общем случае трехмерной динамической модели структурно-неоднородной среды интенсивность напряжений в поверхностном слое образца выше, чем в объеме. Приведем выражение для интенсивности напряжений:

$$\sigma_{eq} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ (\sigma_{11} - \sigma_{22})^2 + (\sigma_{22} - \sigma_{33})^2 + (\sigma_{33} - \sigma_{11})^2 + 6(\sigma_{12}^2 + \sigma_{23}^2 + \sigma_{31}^2) \right]^{1/2}. \quad (12)$$

Благодаря тому, что на свободных поверхностях нормальные компоненты тензора напряжений равны нулю, а в объеме в результате неоднородной структуры все компоненты отличны от нуля, из (12) следует, что уровень интенсивности напряжений на поверхности будет выше, чем в объеме материала. В данном случае этим

можно объяснить зарождение первых пластических сдвигов на поверхности. Полученные результаты качественно согласуются с экспериментами [3, 4, 10, 30] по мезомеханике поверхностных слоев нагруженных твердых тел.

Картинки локализации пластической деформации, представленные на рис. 3, а–д, иллюстрируют иерархию концентраторов напряжений, «работающих» на мезо- и макроуровнях. Первоначально пластическая деформация локализуется преимущественно вдоль границ зерен, выходящих на поверхность (рис. 3, а, б). При дальнейшем нагружении на поверхности и в объеме образца образуется сетка полос сдвига (рис. 3, в, г), локализованных как вдоль границ, так и внутри зерен. На этом этапе определяющее влияние на характер локализации пластической деформации оказывает зеренная структура образца, а именно: геометрические и физико-механические характеристики зерен. С макроскопической точки зрения развитие пластической деформации на данном этапе происходит квазиравномерно, т.е. сетка полос равномерно охватывает весь образец.

При последующем нагружении наблюдается локализация пластической деформации на более крупном масштабном уровне (рис. 3, з, д). Полосы локализации пластической деформации более крупного масштаба образуются вблизи макроскопических концентраторов напряжений, которыми являются угловые точки образца. Характерно, что ориентация и форма образующихся полос полностью определяются макроскопическими параметрами (геометрией образца, граничными условиями и направлением максимальных касательных напряжений) и не зависят от концентраторов напряжений более мелкого масштаба — внутренней структуры мате-

риала. При дальнейшем нагружении развитие пластической деформации практически полностью сосредотачивается в макроскопических полосах локализации.

Послойный анализ деформационных картин в разные моменты времени и сопоставление их с кривой нагружения (рис. 3, *е*) показывают, что первоначальное зарождение пластических деформаций в локальных областях поверхности слабо сказывается на отклонении макроскопической кривой нагружения от линейного поведения. Выход средних напряжений на площадку текучести соответствует стадии нагружения, при которой локализованная пластическая деформация появляется во всем объеме образца.

#### 4. Анализ напряженно-деформированного состояния в мезообъеме двухфазного композиционного материала

##### 4.1. Модель металлокерамического композита $Al/Al_2O_3$ и условия нагружения

Процедура генерации структур металлокерамического композита, представляющего собой алюминиевую матрицу с жесткими включениями корунда, приведена в работах [31, 32]. Металлографический анализ композита [8, 33] свидетельствует о том, что включения корунда имеют неровную форму, характерную для экструдированного порошка. Было замечено, что соответствующую трехмерную модель можно получить путем генерации двухфазной структуры с преимущественным ростом одной фазы.

Первоначально в объеме случайным образом распределялись центры зарождения двух типов, причем количественное соотношение центров первого и второго типа составляло примерно 1 : 3. Рост всех кристаллитов осуществлялся по сферическому закону, однако, скорость роста кристаллитов первой фазы примерно в 3 раза превышала скорость роста элементов второй фазы. Рост первой фазы — матрицы — осуществлялся до тех пор, пока весь объем образца не оказывался заполненным. Рост второй фазы — включений — прекращался, как только ее объем достигал заданной величины, в данном случае 10 %. В результате была получена двухфазная структура с заданным процентным соотношением матрицы и включений и сходная с реальной по геометрическим характеристикам частиц (рис. 4).

Очевидно, что чем больший объем заполняется случайным образом сгенерированной структурой, тем более близкое согласие будет обеспечено между статистическими характеристиками экспериментальной и модельной структур. Исходя из этих соображений первоначально структура была сгенерирована на достаточно подробной кубической сетке размерами  $100 \times 100 \times 100$  элементов (рис. 4, *а*). Однако решение трехмерной задачи механики предъявляет существенно более высокие требования к вычислительным ресурсам (оперативной

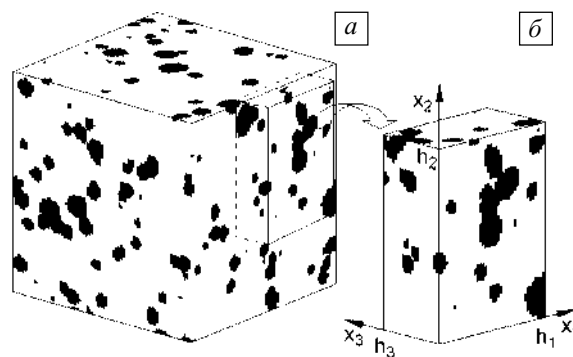


Рис. 4. Структура металлокерамического композита, сгенерированная SSP-методом на сетке  $100 \times 100 \times 100$  (*а*), и фрагмент, выбранный для расчетов (*б*)

памяти компьютера, времени вычисления и др.), чем процедура SSP-генерации. В этой связи тестовые расчеты проводились для фрагмента включающего  $55 \times 41 \times 22$  элементов, вырезанного из первоначально сгенерированной структуры (рис. 4, *б*).

С макроскопической точки зрения такой объем не является представительным, поскольку объем включений составляет 23 % всего объема, причем объемная доля корунда в различных слоях изменяется от 10 до 30 %. Данный фрагмент структуры был выбран для проведения расчетов, так как на включения приходится достаточное количество структурных элементов, что является важным в рамках поставленной задачи исследования неоднородного напряженно-деформированного состояния на мезоуровне.

Согласно экспериментальным данным [8, 33], упрочняющие частицы  $Al_2O_3$  в рассматриваемом диапазоне растяжения (до 0.5 %) демонстрируют упругое поведение, в то время как в алюминиевой матрице наблюдается упругопластическое течение. Пластическая стадия на диаграмме нагружения  $Al(6061)$  характеризуется упрочнением.

Функция, описывающая упругопластический отклик матрицы  $Al(6061)$ , была предложена в [8] в виде:

$$\sigma_h = \sigma_0 + (\sigma_{\max} - \sigma_0)(1 - \exp(-\epsilon_n^p / \epsilon_0)), \quad (13)$$

где  $\epsilon_n^p = \frac{\sqrt{2}}{3} \sqrt{\epsilon_{ij}^p \epsilon_{ij}^p}$  — интенсивность накопленной пластической деформации;  $\sigma_{\max}$  — предельная точка кривой нагружения;  $\sigma_0$  и  $\epsilon_0$  — макроскопический предел упругости и соответствующая ему деформация. Константы материала и параметры аппроксимации приведены в таблице 1.

Поскольку одной из целей работы являлось проведение сравнительного анализа двумерных и трехмерных расчетов, нагружение композита осуществлялось по двум схемам, имитирующим условия, близкие к плоскому напряженному состоянию и плоской деформации.

Таблица 1

Константы материалов и параметры модели [8]						
	$\rho_0$ , г/см <sup>3</sup>	$\mu$ , ГПа	$K$ , ГПа	$\sigma_0$ , МПа	$\sigma_{\max}$ , МПа	$\varepsilon_0$
Al(6061)	2.7	27.7	72.8	105	170	0.048
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	3.99	156	226	–	–	–

Для моделирования растяжения в обоих случаях поверхность  $x_2 = h_2$  перемещалась с постоянной скоростью  $U_{\text{тен}}$  в положительном направлении оси  $X_2$ , а движение поверхности  $x_2 = 0$  вдоль оси  $X_2$  было запрещено (рис. 5):

$$U_2|_{x_2=h_2} = U_{\text{тен}}, \quad U_2|_{x_2=0} = 0. \quad (14)$$

Согласно схеме 1 (рис. 5, а), имитирующей нагружение мезообъема в образце, находящемся с макроскопической точки зрения в условиях, близких к условиям плоского напряженного состояния, поверхности  $x_1 = h_1$ ,  $x_1 = 0$ ,  $x_3 = h_3$  и  $x_3 = 0$  считались свободными от нагрузки:

$$\sigma_{ij}|_{x_1=0} = \sigma_{ij}|_{x_1=h_1} = \sigma_{ij}|_{x_3=0} = \sigma_{ij}|_{x_3=h_3} = 0. \quad (15)$$

В случае схемы 2 (рис. 5, б), имитирующей макроскопические условия плоской деформации, движение поверхностей  $x_1 = 0$  и  $x_1 = h_1$  в направлении оси  $X_1$  было запрещено:

$$U_1|_{x_1=0} = U_1|_{x_1=h_1} = 0. \quad (16)$$

#### 4.2. Развитие деформационных процессов на мезо- и макроуровнях при растяжении

Анализируя полученные результаты, можно выделить два основных фактора, влияющих на неоднородный характер напряженно-деформированного состояния в образцах (рис. 5), а именно: внешние условия нагружения и неоднородная внутренняя структура. Ха-

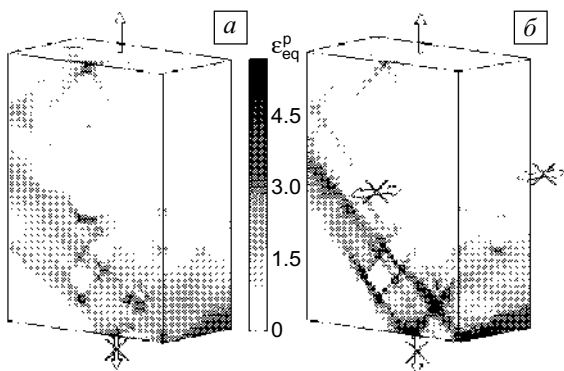


Рис. 5. Интенсивность пластической деформации на поверхности мезообъема, нагруженного по схемам 1 (а) и 2 (б)

рактер локализации на мезоуровне во многом определяется геометрической формой включений и удаленностью от границ раздела. Необходимость выполнения условий непрерывности перемещений на границах фаз с различными физико-механическими характеристиками приводит к возникновению концентрации напряжений в материале упрочняющих частиц и релаксации напряжений в прилегающем материале матрицы за счет развития локализованной пластической деформации.

Сравнивая деформационные картины в образцах, нагруженных по схемам 1 и 2 (рис. 5), отметим, что внешние условия нагружения могут усилить или подавить влияние внутренней неоднородности. Так, при нагружении по схеме 1 поверхности образца являются незакрепленными и неоднородное напряженно-деформированное состояние преимущественно определяется внутренней двухфазной структурой.

При нагружении по схеме 2 запрещение свободного перемещения поверхностей  $x_1 = 0$  и  $x_1 = h_1$  в направлении оси  $X_1$  приводит к возникновению геометрических концентраторов напряжений, более мощных по сравнению с внутренними границами раздела. Это ведет к образованию полосы локализованной пластической деформации более крупного масштаба, охватывающей все сечения образца. Ориентация и форма этой полосы определяются в большей степени геометрией образца и внешними граничными условиями и слабо зависят от неоднородной внутренней структуры.

Еще одним фактором, оказывающим влияние на картину распределения напряжений и деформаций в различных сечениях, является их ориентация по отношению к приложенной нагрузке. Отметим очевидную разницу в деформационных картинах, наблюдающихся в сечениях, расположенных параллельно (рис. 6) и перпендикулярно (рис. 7) оси растяжения. В первом случае сечения  $x_1 = \text{const}$  с макроскопической точки зрения испытывают растяжение вдоль оси  $X_2$  и сжимаются в направлении  $X_3$ . Такой тип нагружения приводит к формированию полос локализованного сдвига, направленных по отношению к оси растяжения под углом  $\approx 45^\circ$ . В случае нагружения по схеме 1 (рис. 6) наблюдаются мелкие, соизмеримые с размером включений, полосы локализации, наиболее ярко выраженные в окрестности внутренних границ раздела. В случае нагружения по схеме 2 полосы локализации в рассматриваемых плоскостях определяются в большей степени внешними граничными условиями, благодаря чему имеют более крупный масштаб, сохраняя при этом такую же ориентацию по отношению к направлению растяжения. Полученные деформационные картины качественно согласуются с данными экспериментов [8, 33].

Сечения  $x_2 = \text{const}$ , расположенные перпендикулярно оси растяжения, находятся в условиях двусосного сжатия, что препятствует в этих сечениях образованию



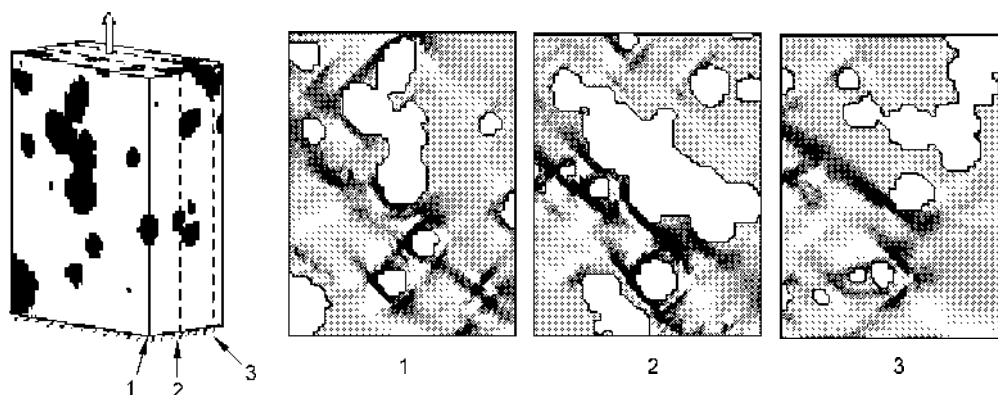


Рис. 6. Интенсивность пластической деформации в сечениях, расположенных параллельно оси растяжения

полос локализованной деформации, но приводит к локализации непосредственно вокруг границ включений (рис. 7).

Проанализируем эволюцию напряженно-деформированного состояния на начальной стадии растяжения. Как показали расчеты, проведенные в работе [31], в случае металлокерамического композита влияние поверхности на процесс зарождения пластических сдвигов не всегда является определяющим. Было показано, что в случае структуры, рассматриваемой в [31] при аналогичных условиях нагружения, первые пластические сдвиги зародились в объеме образца вблизи угловой точки включения, которое являлось мощным концентратором напряжений в силу своих геометрических особенностей. Отсюда был сделан вывод, что в случае композиционного материала, содержащего компоненты, существенно отличные по механическим свойствам и

характеризующиеся сложной геометрической формой включений, концентрация напряжений вблизи внутренних границ может быть причиной возникновения первичных трещин не на поверхности, а в объеме материала. Однако в случае рассматриваемой в настоящей работе структуры при обеих схемах нагружения первые пластические сдвиги зародились на поверхности образца, что, по-видимому, обусловлено как структурными особенностями, так и геометрией образца (форма тонкого бруса).

Проанализируем кривые 1 и 2, представленные на рис. 8 (схема нагружения 1). Кривая 1 представляет собой среднюю интенсивность напряжений, которая определяется выражением

$$\langle \sigma_{ii} \rangle = \frac{1}{V} \int_V \sigma_{ii} dV, \quad (17)$$

или с учетом дискретизации расчетной области

$$\langle \sigma_{ii} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_{ii}, \quad (18)$$

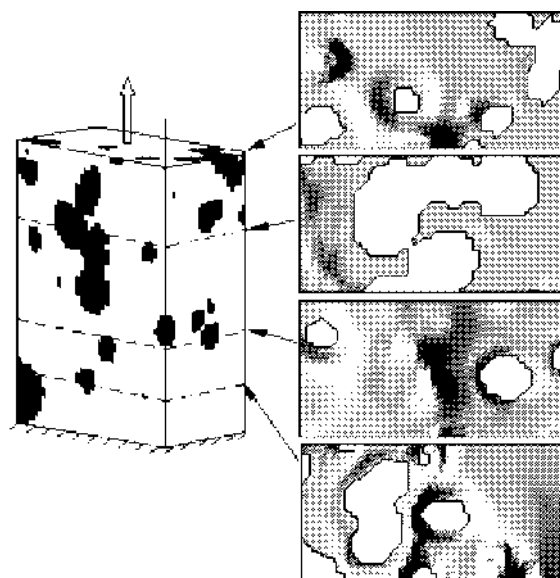


Рис. 7. Интенсивность пластической деформации в сечениях, расположенных перпендикулярно оси растяжения

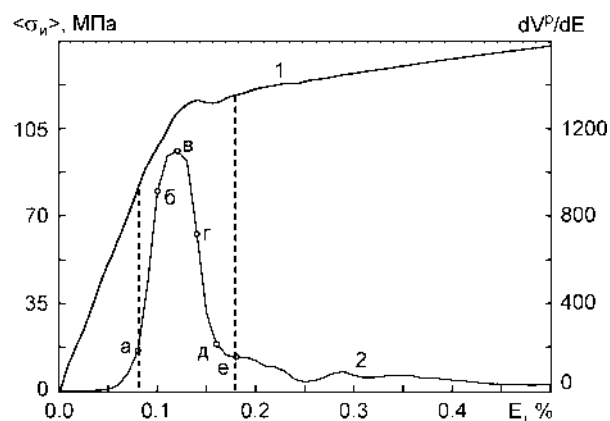


Рис. 8. Изменение объема пластически деформированного материала матрицы (2) и средняя интенсивность напряжений (1) в зависимости от степени удлинения образца

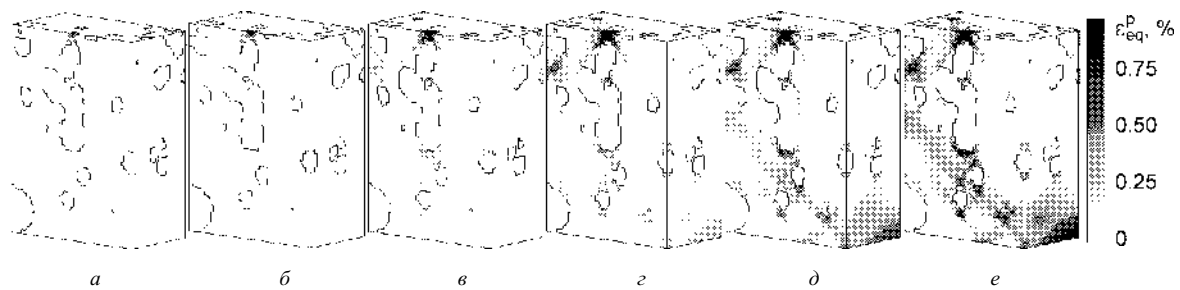


Рис. 9. Пластическая деформация на поверхности образца, нагруженного по схеме 1, при разных степенях удлинения (см. рис. 8)

где  $V$  — объем образца;  $N$  — количество ячеек расчетной области. Скорость вовлечения в пластическую деформацию материала матрицы (кривая 2) определяется как  $dV^p/dE$ , где  $V^p$  — процентное отношение пластически деформированных ячеек к общему числу ячеек матрицы, а  $E = (L - h_2)/h_2 \cdot 100\%$ , где  $h_2$  и  $L$  — начальная и текущая длины образца вдоль оси  $X_2$  (см. рис. 5).

В результате существенной разницы упругих свойств матрицы и включений концентрация напряжений вблизи внутренних границ раздела значительно превышает средний уровень приложенных напряжений уже на начальной стадии нагружения. Благодаря этому первые пластические сдвиги зарождаются в локальных областях мезообъема при удлинении образца  $\approx 0.04\%$ , при соответствующем уровне средних напряжений примерно в 2.7 раза ниже макроскопического предела упругости матрицы (см. табл. 1). С момента появления первых пластических сдвигов и до  $E \approx 0.12\%$  объем пластически деформированного материала резко возрастает, что свидетельствует о преимущественной роли процессов зарождения новых пластических сдвигов в локальных областях матрицы. Максимальное значение скорости вовлечения материала в пластическое течение соответствует макроскопическому пределу текучести (см. кривую 1 на рис. 8). Достигнув максимального значения, скорость зарождения новых пластических сдвигов резко снижается. После того как пластическая деформация охватывает 63 % матрицы, кривая 2 выходит на

горизонтальный участок, после которого вся дальнейшая пластическая деформация происходит в полосах локализации, сформированных на предыдущей стадии. Эволюция пластической деформации на поверхности образца на разных стадиях нагружения представлена на рис. 9.

Суммируя вышесказанное, можно сделать вывод, что в рассматриваемом случае зарождение и формирование полос локализованной пластической деформации происходят в основном на стадии нагружения, соответствующей линейной зависимости средних напряжений от удлинения образца. Интенсивное развитие пластического течения в уже сформированных полосах локализации соответствует стадии упрочнения на макроскопической кривой нагружения.

#### 4.3. Сравнительный анализ трехмерной и двумерных моделей

Одним из дискуссионных вопросов современной механики является вопрос о диапазоне применимости двумерных моделей для описания поведения структурно-неоднородных сред на мезоуровне в случае явного учета внутренней структуры, так как реальные среды трехмерны по своей физической природе.

На рис. 10 схематически представлены структуры, рассматриваемые в трехмерной формулировке и двумерных приближениях плоского напряженного состояния и плоской деформации.

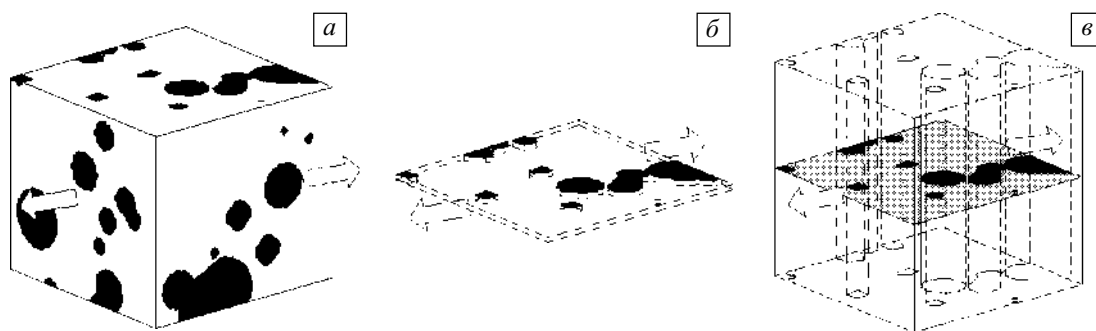


Рис. 10. Схематическое представление структур в трехмерном случае (а) и двумерных приближениях плоского напряженного состояния (б) и плоской деформации (в)

характеризуется структурными элементами, имеющими конечные размеры во всех пространственных направлениях (рис. 10, *а*). Плоское напряженное состояние реализуется в тонких пластинах или пленках (рис. 10, *б*), толщина которых намного меньше длины и ширины и компоненты тензора напряжений в направлении третьей координаты принимаются равными нулю. И, наконец, в случае плоской деформации структурные элементы представляют собой бесконечные цилиндры с поперечными сечениями различной формы (рис. 10, *в*). Смещения и соответственно деформации вдоль осей цилиндров считаются равными нулю.

Для исследования вопроса о степени соответствия двумерных и трехмерных моделей в случае двухфазного композита, наряду с исследованием напряженно-деформированного состояния в трехмерной композиционной структуре, была поставлена задача проведения сравнительного анализа трехмерной постановки и ее двумерных аналогов — плоской деформации и плоского напряженного состояния. Двумерные расчеты были проведены для 22 плоских структур, соответствующих сечениям трехмерного образца. Все приведенные далее выводы основаны на сравнительном анализе, проведенном для всех 22 сечений, и проиллюстрированы на примере нескольких выбранных структур (рис. 11, *а*). Сравнение проводилось при степени удлинения образца  $E = 0.5\%$ .

Предполагалось, что двумерным аналогом трехмерной схемы нагружения 1 является постановка плоского напряженного состояния и соответственно для схемы 2 — двумерное приближение плоской деформации. Исходя из этого сравним распределения пластических деформаций в сечениях трехмерного образца и их двумерных аналогов (рис. 11).

Результаты показывают, что, хотя в целом в характере распределения деформаций присутствуют общие тенденции, в локальных областях отмечаются достаточно существенные количественные и качественные отличия. Причем даже на поверхностях трехмерного образца (сечения 1 и 5, рис. 11) картины пластической деформации значительно отличаются от случаев плоской деформации и плоского напряженного состояния. Анализ, проведенный по всем сечениям, подтверждает справедливость сделанных выводов — приемлемого соответствия двумерных и трехмерных расчетов не наблюдается ни для одного из исследуемых сечений.

Воспользуемся приемами статистического анализа для количественного сравнения напряженно-деформированного состояния в двумерных и трехмерных постановках задачи. На рис. 12 приведены суммарные частоты встреч интенсивностей напряжений и пластических деформаций в трехмерном образце и соответствующих двумерных структурах, рассчитанных в постановках плоской деформации и плоского напряженного состояния. Суммарная частота встреч  $Q$  показывает,

какой процент ячеек расчетной области имеет соответствующую степень деформации и напряжений. Пусть, например,  $a$  — анализируемая функция (в данном случае напряжения или деформации), монотонно изменяющаяся в рассматриваемом диапазоне, а  $Q(a)$  — соответствующая частота встреч. Тогда для любого участка частотной кривой, заключенного между любыми значениями  $a_1$  и  $a_2$  ( $a_1 < a_2$ ), справедлив вывод, что  $(Q(a_1) - Q(a_2))\%$  ячеек расчетной области демонстрируют значения параметра  $a$  в диапазоне от  $a_1$  до  $a_2$ . Очевидно, что чем круче участок частотной кривой, тем больше ячеек расчетной области демонстрируют деформации или напряжения в данном диапазоне.

Проанализируем частотные зависимости интенсивности напряжений, приведенные на рис. 12, *а*. Во всех рассматриваемых случаях примерно в 80 % материала напряжения достигают порядка 120 МПа, что соответствует среднему уровню напряжений в матрице при степени удлинения 0.5 % (см. кривую нагружения на рис. 8). Уровень напряжений во включениях изменяется в довольно широком диапазоне от 125 до 1600 МПа. Наиболее высокая концентрация напряжений наблюдается вблизи границ включений. Следует отметить, что объем областей с высокой концентрацией напряжений составляет не более 3–5 % от общего объема материала и не вносит существенный вклад в величину средних напряжений. Однако именно в этих областях при дальнейшем нагружении может произойти зарождение трещин. Поэтому анализ неоднородного напряженно-деформированного состояния на мезоуровне становится особенно важным с точки зрения предсказания разрушения.

Частотные кривые интенсивности напряжений, полученные в двумерных и трехмерных расчетах демонстрируют существенное отличие, наиболее ярко проявляющееся во включениях (см. участки кривых  $\sigma_n > 125$  МПа). Причем расхождение не превышает 5 % между кривыми 3D-моделирования по двум разным схемам и 1 % между кривыми, рассчитанными в постановках плоского напряженного состояния и плоской деформации, тогда как разница между трехмерными и двумерными расчетами достигает 12 %. Таким образом, выбор 2D или 3D постановки задачи оказывает более существенное влияние на количественные характеристики напряженного состояния, чем схема нагружения.

Проанализируем частотные зависимости интенсивности накопленной пластической деформации в матрице, приведенные на рис. 12, *б*. Объем включений не учитывался, т.е. за 100 % принимался весь объем материала матрицы. В отличие от интенсивности напряжений (рис. 12, *а*), частотные характеристики пластических деформаций в трехмерном расчете по схеме 1 и в двумерном случае плоской деформации близки при  $\epsilon_n^p > 0.5\%$ , т.е. совпадают количественные соотношения областей, испытывающих одинаковую пластичес-

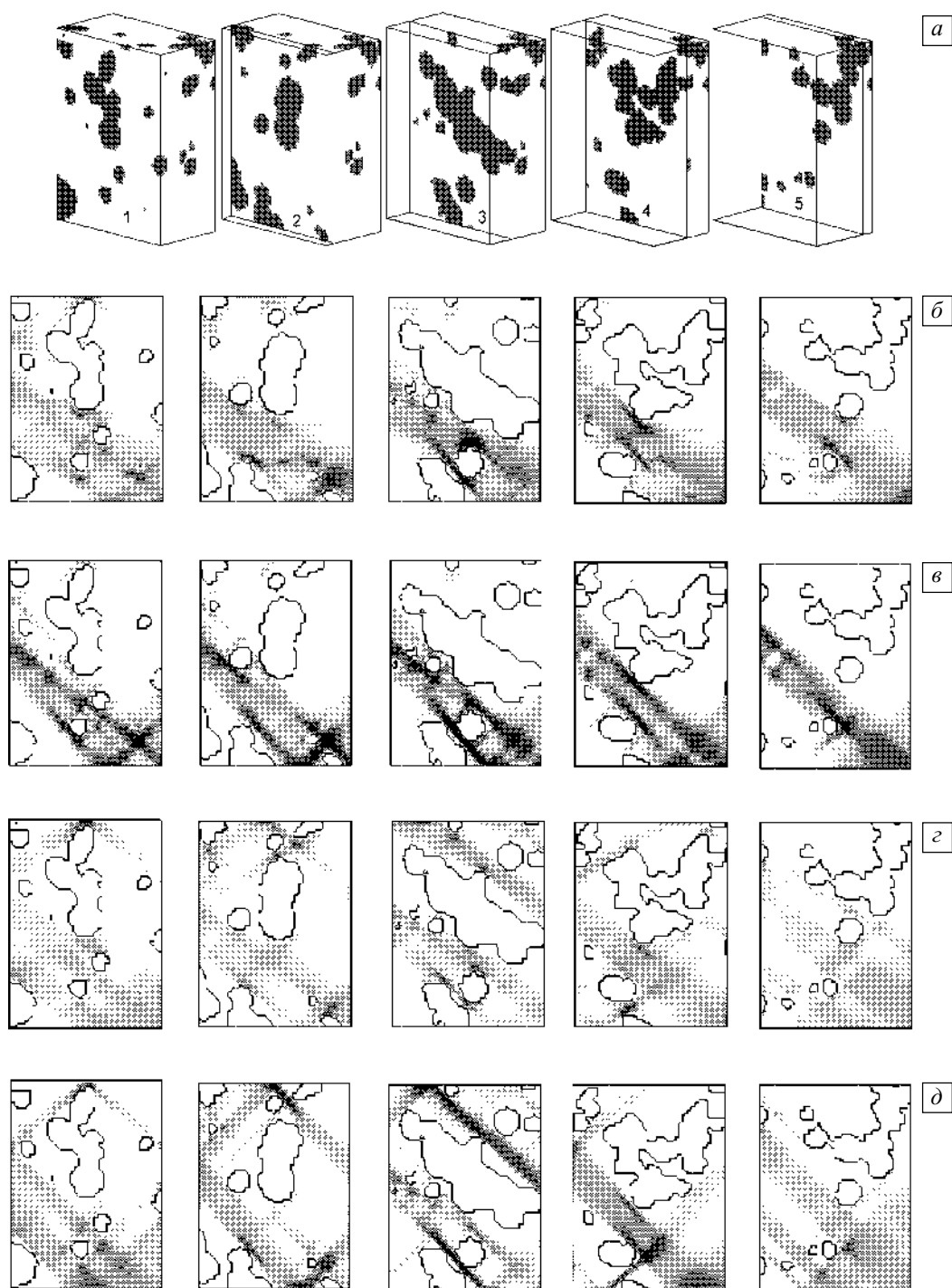


Рис. 11. Интенсивность пластической деформации в сечениях трехмерного образца (а), нагруженного по схемам 1 (б) и 2 (в) и аналогичных двумерных структурах, рассчитанных в приближении плоского напряженного состояния (з) и плоской деформации (д)

кую деформацию. Однако это не означает, что совпадут также картины распределения пластических деформаций на мезоуровне (ср. рис. 11, б, д). Вопрос о том, является ли количественное совпадение интенсивностей пластических деформаций в данном случае случайнос-

тью или закономерностью требует дополнительного рассмотрения и пока остается для автора открытым.

Распределения интенсивностей пластических деформаций в случае 3D-расчета по схеме 2 и его двумерного аналога в постановке плоской деформации де-

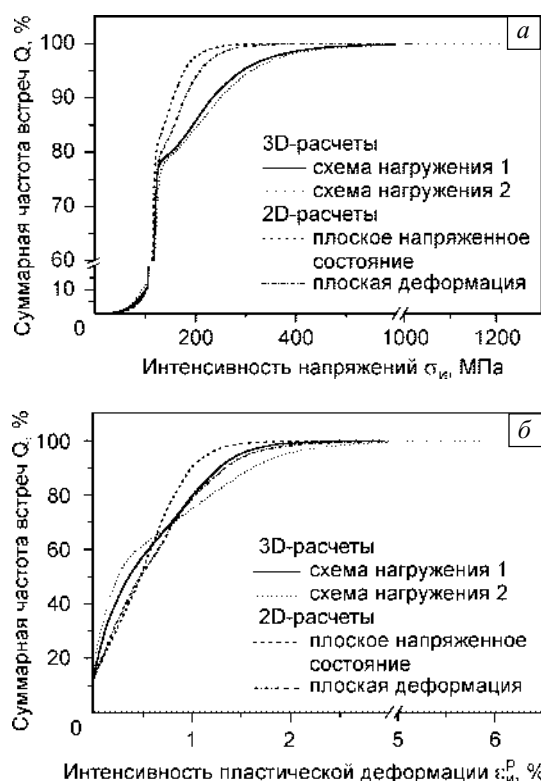


Рис. 12. Суммарные частоты встреч интенсивностей напряжений (а) и пластических деформаций (б) по всем сечениям 3D-образцов и соответствующим 2D-структурам

монстрируют существенное качественное (ср. рис. 11, в и д) и количественное расхождение. Кривые пересекаются при 0.5 % деформации, что соответствует степени удлинения образца, а по отклонению кривых относительно данной величины деформации можно дополнительно судить о характере локализации.

Основными причинами расхождения результатов трехмерных и двумерных расчетов является сложное напряженно-деформированное состояние, реализующееся вблизи внутренних границ раздела в трехмерном случае. Как уже было отмечено, любая двумерная постановка задачи основывается на предположениях, что определенные компоненты тензоров напряжений и/или деформаций равны нулю. И такие допущения являются абсолютно правомерными и корректными в случае однородного материала [13]. Однако в случае структурно-неоднородной среды напряженно-деформированное состояние всегда характеризуется трехмерностью, т.е. всегда существуют локальные области, в которых все компоненты тензоров напряжений и деформаций отличны от нуля. Расчеты для композиционного материала, представленные в настоящей работе, дополнительно подтверждают этот вывод.

На рис. 13 представлены относительные частоты встреч компонентов тензоров напряжений и пластичес-

ких деформаций, полученные в расчетах по схемам нагружения 1 и 2 соответственно. Относительная частота встреч  $q$  показывает процентное отношение объема материала с соответствующей степенью напряжений или деформаций. Пики на кривых соответствуют наибольшей частоте встреч, т.е. средней величине соответствующей характеристики.

В случае нагружения по схеме 2 (рис. 13, б) средняя величина компоненты тензора деформации  $\epsilon_{11}^p$  близка к нулю, что с макроскопической точки зрения удовлетворяет двумерной постановке задачи плоской деформации. Вместе с тем, в локальных областях мезообъема, а именно, вблизи границ включений, значения всех компонент тензора пластических деформаций напряжений и деформаций отличны от нуля и сравнимы между собой. Так как объем материала вблизи границ включений мал по сравнению с общим объемом материала, очевидно, что экстремальные значения компонент соответствуют минимальной частоте встреч. Такие же выводы справедливы и в отношении компонент тензора напряжений в случае нагружения по схеме 1 (рис. 13, а).

Количественные характеристики средних и экстремальных значений различных компонент напряжений и деформаций приведены в таблице 2. Отрицательные значения диагональных компонент тензоров напряжений и деформаций соответствуют сжатию, а положительные — растяжению.

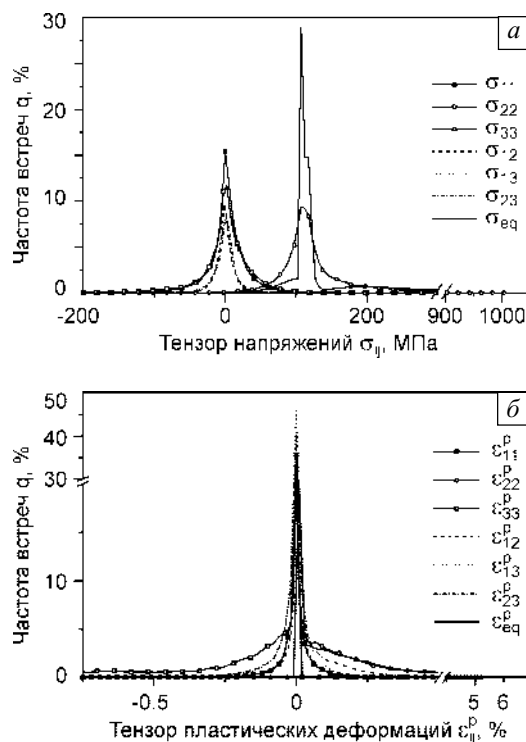


Рис. 13. Относительные частоты встреч тензоров напряжений (а) (схема нагружения 1) и деформаций (б) (схема нагружения 2)

Таблица 2

Средние и экстремальные значения компонент тензоров напряжений и пластической деформации в трехмерных структурах, нагруженных по схемам 1 и 2 до 0.5 % удлинения

$\varepsilon_{ij}^p$	$\langle \varepsilon_{ij}^p \rangle, \%$	$\varepsilon_{ij_{\min}}^p, \%$	$\varepsilon_{ij_{\max}}^p, \%$	$\sigma_{ij}$	$\langle \sigma_{ij} \rangle, \text{МПа}$	$\sigma_{ij_{\min}}, \text{МПа}$	$\sigma_{ij_{\max}}, \text{МПа}$
$\varepsilon_{11}^p$	-0.179/-0.003*	-2.36/-1.1*	0.3/0.9*	$\sigma_{11}$	-0.004/59.5*	-695/-303*	387/520*
$\varepsilon_{22}^p$	0.38/0.49*	-0.058/-0.2*	4.1/5.1*	$\sigma_{22}$	127/149*	-324/-157*	1018/1265*
$\varepsilon_{33}^p$	-0.19/-0.47*	-2.48/-4.8*	0.4/0.37*	$\sigma_{33}$	-0.0135/-0.006*	-845/-1161*	396/542*
$\varepsilon_{12}^p$	-0.0006/-0.002*	-1.4/-1.4*	1.1/1.4*	$\sigma_{12}$	-0.047/2.5*	-194/-278*	266/415*
$\varepsilon_{13}^p$	-0.007/-0.008*	-1.2/-1.5*	0.9/1.5*	$\sigma_{13}$	0.011/0.007*	-147/-166*	283/306*
$\varepsilon_{23}^p$	0.002/-0.0002*	-1.8/-2.0*	1.2/2.9*	$\sigma_{23}$	-0.061/-0.16*	-197/-410*	273/328*
$\varepsilon_{\text{eq}}^p$	0.405/0.58*	0/0*	4.24/5.9*	$\sigma_{\text{eq}}$	138/141*	8.4/10.96*	1017/1241*

\* — значения для схемы нагружения 2

Обобщая данные, приведенные в таблице 2, и зависимости, представленные на рис. 13, можно прийти к заключению, что при любой схеме нагружения на мезоуровне существуют локальные области, в которых все компоненты тензоров напряжений и деформаций дают соизмеримый вклад в напряженно-деформированное состояние, или, по крайней мере, соизмеримый по отношению к средним значениям других компонент. Даже учитывая тот факт, что внешнее нагружение имитирует условия плоского напряженного состояния (схема 1) или плоской деформации (схема 2), вблизи границ раздела в объеме образца имеет место трехмерное напряженно-деформированное состояние и вклад всех компонент тензора напряжений и деформаций вблизи границ раздела оказывается довольно существенным.

## 5. Заключение

В работе изложен подход к моделированию в трехмерной постановке поведения неоднородных материалов под нагрузкой с явным учетом внутренней структуры мезоскопического масштаба. Для введения в расчеты структурной неоднородности предложен метод генерации объемных структур, основанный на процедуре пошагового заполнения дискретного объема структурными элементами (SSP-метод). Изложенный подход применен для моделирования упругопластического поведения поликристаллического алюминиевого сплава и металлокерамического композита в условиях квазистатического растяжения. Проведен анализ развития пластической деформации на поверхности и в объеме исследуемых структур.

Согласно концепциям физической мезомеханики [1–4, 30] поверхность образца является специфическим структурным уровнем деформации и играет определяющую роль в процессе зарождения дефектов. В настоящей работе с позиций математического аппарата механики показано и подтверждено численными экспериментами по нагружению поликристаллического

алюминия, что зарождение первых пластических сдвигов вблизи границ зерен и включений, выходящих на поверхность, является результатом напряженно-деформированного состояния в этой области — интенсивность напряжений на поверхности образца выше, чем в объеме в результате отсутствия на поверхности нормальных компонент тензора напряжений.

Для металлокерамического композита Al/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> в условиях растяжения проанализированы деформационные картины в различных сечениях и вклад, вносимый различными компонентами тензоров напряжений и деформаций. Показано, что основными факторами, влияющими на неоднородный характер распределения напряжений и деформаций в образцах, являются внешние условия нагружения и неоднородная внутренняя структура. Благодаря высокой концентрации напряжений вблизи границ включений пластическая деформация в локальных областях упругопластической матрицы начинается при степени удлинения образца  $\approx 0.04\%$  и при уровне средних напряжений примерно в 2.7 раза ниже макроскопического предела текучести. Формирование областей локализованной пластической деформации практически полностью завершается на стадии пропорциональной зависимости средних напряжений от степени удлинения, и на стадии упрочнения пластическая деформация продолжается в уже сформировавшихся областях локализации.

Одним из дискуссионных вопросов современной вычислительной механики является определение границ применимости двумерной постановки задачи при моделировании поведения структурно-неоднородных материалов на мезоуровне с явным учетом внутренней структуры. Очевидно, что при введении в рассмотрение структурной неоднородности напряженно-деформированное состояние в объеме и на поверхности материала не будет точно соответствовать макроскопическим условиям плоского напряженного состояния или плоской деформации. Однозначно определить границы приме-

нимости двумерной постановки не представляется возможным — степень несоответствия будет определяться условиями нагружения, геометрическими особенностями структуры, механическими свойствами структурных элементов и другими факторами. Ответ на поставленные вопросы в каждом конкретном случае может дать сравнительный анализ напряженно-деформированного состояния, реализующегося при трехмерной постановке задачи и соответствующем двумерном приближении.

В настоящей работе вопрос о степени соответствия двумерных и трехмерной моделей был рассмотрен на примере двухфазной композиционной структуры. Сравнительный анализ результатов трехмерных и двумерных расчетов показал, что в случае композиционного материала, содержащего компоненты с существенно различными механическими свойствами, характеристики напряженно-деформированного состояния в объемном и двумерном случае могут иметь существенные качественные и количественные отличия, наиболее ярко выраженные вблизи границ раздела.

В заключение отметим, что исследование деформационных процессов в объеме и на поверхности структурно-неоднородных материалов является важным приложением изложенного подхода. Большинство экспериментальных методик исследования поведения материалов в процессе деформации сводятся к наблюдениям поверхности образцов. Исследование деформации внутренней структуры осуществляется после снятия нагрузки, что позволяет получить лишь косвенные данные о механизмах деформации и эволюции структуры внутри материала в условиях активного нагружения. В связи с этим изложенный подход к моделированию является перспективным инструментом исследования в дополнение к экспериментальным методикам.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента РФ для поддержки ведущих научных школ (НШ-2324.2003.1), Фонда содействия отечественной науке и Российско-американской программы «Фундаментальные исследования и высшее образование» (BRNE), проект № ТО-016-02.

Автор выражает глубокую признательность к.ф.-м.н. Балохонову Р.Р. и д.ф.-м.н. Макарову П.В. за полезные дискуссии и ценные замечания.

## Литература

1. *Физическая мезомеханика и компьютерное конструирование материалов* / Под ред. В.Е. Панина. — Новосибирск: Наука, 1995. — Т. 1. — 298 с., Т. 2. — 320 с.
2. Панин В.Е. Синергетические принципы физической мезомеханики // *Физ. мезомех.* — 2000. — Т. 3. — № 6. — С. 5–36.
3. Панин В.Е., Гришяев Ю.В. Физическая мезомеханика — новая парадигма на стыке физики и механики деформируемого твердого тела // *Физ. мезомех.* — 2003. — Т. 6. — № 4. — С. 9–36.
4. Панин В.Е. Физическая мезомеханика поверхностных слоев твердых тел // *Физ. мезомех.* — 1999. — Т. 2. — № 6. — С. 5–24.
5. *Role of Mesomechanics for Development of Science and Technology* // *Proc. of Int. Conf.*, Xi'an, 13–16 June, 2000. — Beijing: Tshinghua University Press, 2000. — V. 1, 2. — 1163 p.
6. *Proc. of Int. Conf. on New Challenges in Mesomechanics*, Aalborg University, Denmark, August 26–30, 2002 / Ed. by R. Pyrz, J. Schjødt-Thomsen, J.C. Rauhe, T. Thomsen, L.R. Jensen. — Aalborg, Denmark: Aalborg University Press, 2002. — V. 1, 2. — 683 p.
7. Makarov P.V., Schmauder S., Cherepanov O.I., Smolin I.Yu., Romanova V.A., Balokhonov R.R., Saraev D.Yu., Soppa E., Kizler P., Fischer G., Hu S., Ludwig M. Simulation of elastic plastic deformation and fracture of materials at micro-, meso- and macrolevels // *Theor. Appl. Fract. Mech.* — 2001. — V. 37. — No. 1–3. — P. 183–244.
8. Soppa E., Schmauder S., Fischer G., Thesing J., Ritter R. Influence of the microstructure on the deformation behaviour of metal-matrix composites // *Comput. Mater. Sci.* — 1999. — V. 16. — P. 323–332.
9. Toyooka S., Widiastuti R., Zhang Q., Kato H. Dynamic observation of localized pulsation generated in the plastic deformation process by electronic speckle pattern interferometry // *Jpn. Appl. Phys.* — 2001. — V. 40. — P. 873–876.
10. Панин А.В., Клименов В.А., Абрамовская Н.Л., Сон А.А. Зарождение и развитие потоков дефектов на поверхности деформируемого твердого тела // *Физ. мезомех.* — 2000. — Т. 3. — № 1. — С. 83–92.
11. Romanova V., Balokhonov R., Makarov P., Schmauder S. and Soppa E. Simulation of elasto-plastic behaviour of an artificial 3D-structure under dynamic loading // *Comput. Mater. Sci.* — 2003. — V. 28. — Iss. 3–4. — P. 518–528.
12. Романова В.А., Балохонов Р.Р., Карпенко Н.И. Моделирование механического поведения материалов с учетом трехмерной внутренней структуры // *Физ. мезомех.* — 2004. — Т. 7. — № 2. — С. 71–79.
13. Седов Л.И. Механика сплошной среды. — М.: Наука, 1983. — 528 с.
14. Ударные волны и экстремальные состояния вещества / Под ред. В.Е. Фортова, Л.В. Альтшулера, Р.Ф. Трунина, А.И. Фунтикова. — М.: Наука, 2000. — 425 с.
15. Уилкинс М. Расчет упругопластических течений // *Вычислительные методы в гидродинамике* / Под ред. О. Олдера, С. Фернбаха, М. Потенберга. — М: Мир, 1967. — С. 212–263.
16. Wilkins M.L., Guinan M.W. Plane stress calculations with a two dimensional elastic-plastic computer program, UCRL-77251. — University of California, Lawrence Livermore Laboratory, 1976. — 16 p.
17. Уилкинс М. Конечно-разностная схема для решения задач, зависящих от трех пространственных координат и времени // *Численные методы в механике жидкостей*. — М.: Мир, 1973. — С. 115–119.
18. Wilkins M. Use of artificial viscosity in multidimensional fluid dynamic calculations // *J. of Comput. Phys.* — 1980. — V. 36. — P. 281–303.
19. Рухтмайер Р., Мортон К. Разностные методы решения краевых задач. — М.: Мир, 1972. — 418 с.
20. Jensen D.J. Microstructural characterization in 3 dimensions // *Proc. Int. Conf. “New Challenges in Mesomechanics”* (Mesomechanics'2002), Aalborg, Denmark, August 26–30, 2002 / Ed. by R. Pyrz, J. Schjødt-Thomsen, J.C. Rauhe, T. Thomsen, L.R. Jensen. — 2002. — P. 541–547.
21. Buffiere J., Maire E., Cloetens P., Lormand G., Fougères R. Characterization of internal damage in a MMC using X-ray synchrotron phase contrast microtomography // *Acta Mater.* — 1999. — V. 47. — P. 1613–1625.
22. Anderson M.P., Srolovitz D.J., Crest G.S., Sahni P.S. Monte Carlo simulation of grain growth in textured metals // *Acta Metal.* — 1984. — V. 32. — P. 783–789.
23. Kawasaki K., Nagai T., Nakashima K. Vertex models for two-dimensional grain growth // *Phil. Mag. B.* — 1998. — V. 60. — P. 399–407.
24. Ghosh S., Nowak Z., Lee K. Quantitative characterization and modeling of composite microstructures by Voronoi cells // *Acta Mater.* — 1997. — V. 45. — P. 2215–2237.
25. Geiger J., Roys A., Barkoczy P. Simulation of grain coarsening in two dimensions by cellular automaton // *Acta Mater.* — 2001. — V. 49. — P. 623–629.

26. Krill C.E., Chen L.-Q. Computer simulation of 3-D grain growth using a phase-field model // *Acta Mater.* – 2002. – V. 50. – P. 3057–3073.
27. *Continuum scale simulation of engineering materials* / Eds. by D. Raabe, F. Roters, F. Barlat, Chen Long-Qing. – Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2004. – 846 p.
28. Matsuura K., Itoh Y., Ohmi T., Ishii K. Evaluation of grain shape distribution in polycrystalline materials // *Mater. Trans. JIM.* – 1994. – V. 35. – No. 4. – P. 247–253.
29. Карден А.Е., Вильямс П.Е., Кэри Р.Р. Кривые деформации алюминиевого сплава 6061 при высокой и низкой скоростях растяжения // Ударные волны и явления высокоскоростной деформации металлов / Под ред. М.А. Мейерса, Л.Е. Мурра. – М.: Металлургия, 1984. – С. 51–60.
30. Панин А.В., Панин В.Е., Почивалов Ю.И., Клименов В.А., Чернов И.П., Валиев Р.З., Казаченок М.С., Сон А.А. Особенности локализации деформации и механического поведения титана ВТ1-0 в различных структурных состояниях // *Физ. мезомех.* – 2002. – Т. 5. – № 4. – С. 73–84.
31. Романова В.А., Балохонов Р.Р. Моделирование механического поведения композита Al/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> с учетом трехмерной внутренней структуры // *Физ. мезомех.* – 2004. – Т. 7. – Спец. вып. – Ч. 1. – С. 27–30.
32. Romanova V.A., Balokhonov R.R. Numerical simulation of elastoplastic deformation of artificial 3D structures // *Multiscaling in Applied Science and Emerging Technology. Fundamentals and Applications in Mesomechanics. Proc. VI Int. Conf. on Mesomechanics, May 31 – June 4, 2004, Patras, Greece.* – Patras: Patras University, 2004. – P. 266–272.
33. Sopha E., Schmauder S., Fischer G., Brollo J., Weber U. Deformation and damage in Al/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> // *Comput. Mater. Sci.* – 2003. – V. 28. – P. 574–586.