

ЧИСЕЛЬНЕ МОДЕЛЮВАННЯ НАПРУЖЕНЬ ТА ДЕФОРМАЦІЙ ПРОСТИХ КОМПОЗИЦІЙНИХ ЕЛЕМЕНТІВ ІЗ ЗАСТОСУВАННЯМ ЙМОВІРНІСНОГО ПІДХОДУ

Розглянуто специфіку чисельного моделювання простих композиційних елементів на основі концептуальних положень ймовірнісного підходу до моделювання напружень та деформацій конструктивних матеріалів під дією навантажень. Проведено порівняння результатів моделювання порошковозміцненого композиту на основі металевої матриці (ММК) і традиційних металевих конструктивних матеріалів із експериментальними даними. Особлива увага приділена аналізу еквівалентних швидкостей пластичної та дифузної деформації як параметрів, що визначають формування деформаційного пошкодження матеріалів.

Ключові слова: композити на основі металевої матриці; залежність напружень від деформації; ймовірнісна модель пошкодження; еквівалентна швидкість деформації.

Вступ і постановка задачі

Моделювання поведінки багатокомпонентних композиційних матеріалів, що виконані на основі часток або волокон в якості зміцнюючої фази, а також різного виду пластиків чи металевих матриць в якості фази зв'язуючого, і які широко застосовуються у сучасній авіації, не зважаючи на все їх різноманіття, нерозривно пов'язане із тими самими типовими проблемами, що і моделювання традиційних конструктивних металів і сплавів. Зокрема, для опису поведінки матеріалів обох типів широко використовуються вузькоспеціалізовані, але добре адаптовані для певних діапазонів температур, навантажень чи інших умов взаємодії моделі, що складно узагальнюються на більш широкі діапазони умов експлуатації [1–3]. В той же час, при виборі певної розрахункової моделі часто доводиться оперувати набором властивостей матеріалу, що складно піддаються чіткій кількісній оцінці [4, 5]. Іншими словами, такі властивості визначають вибір моделі, проте не пояснюються самою моделлю. Наприклад, буде матеріал себе поводити в заданих умовах крихко чи пластично, яким є взаємозв'язок статичної та довготривалої міцності, повзучості і нагартування, текучості і теплоти плавлення. З іншої сторони відомо, що є лише декілька типових форм атомарної решітки та форм молекулярних з'єднань, зокрема йонний, ковалентний, ван-дер-ваальсовий зв'язок, вплив молекулярних зв'язків внаслідок вулканізації, а калориметричні властивості металів взагалі подібні, якщо ввести

певний масштабний фактор, прив'язавшись до атомарної будови та температури Дебая [6].

Таким чином, постає питання, наскільки можливо описати механічну поведінку матеріалу, виходячи не стільки із феноменологічних даних про кожний конкретний матеріал [7, 8], скільки із загально фізичного аналізу на основі його базових параметрів, таких як атомна маса, міжатомна відстань, коефіцієнти функції потенціальної енергії міжатомної взаємодії та інші подібні величини [9, 10]. Безпосередня задача, яку необхідно розв'язати для отримання відповіді на поставлене питання, полягає у встановленні кількісної залежності між умовами навантаження і умовами проведення експерименту та механічною поведінкою матеріалу. В даному дослідженні представлено розв'язок даної задачі для випадку моделювання напружень та деформацій простих композиційних елементів на основі металевої матриці та із застосуванням ймовірнісного підходу.

Ймовірнісний підхід до моделювання механічної поведінки матеріалів

Структурні елементи матеріалу на різних рівнях масштабування, а саме на нано-, мікро- чи макрорівні, пов'язані між собою силовою взаємодією. Була висунута гіпотеза, яка полягає у тому, що механічна поведінка матеріалу визначається співвідношенням того часу, протягом якого ця силова взаємодія проявляється на рівні, достатньому для суттєвого впливу на перебіг досліджуваного

явища, а саме на виникнення внутрішніх напружень у матеріалі у відповідь на силові чи температурні зовнішні впливи, що термінологічно позначається як наявність зв'язку між вказаними структурними елементами, і того часу, протягом якого дана силова взаємодія проявляється на рівні, навпаки, недостатньому для вказаного суттєвого впливу, що термінологічно позначається як відсутність чи розрив зв'язку. Розглянемо особливості формування і часову стабільність цієї характеристики, а саме силовій взаємодії між структурними частинками матеріалу, детальніше, щоб встановити, зокрема, чи відноситься вона до тих параметрів, дискретністю зміни яких можна знехтувати, тобто чи відбувається перехід від наявності зв'язку до його відсутності і навпаки стрибкоподібно або ж неперервно.

Відомо, що атомарні частки у твердому тілі знаходяться у стані постійно підтримуваної динамічної рівноваги теплових коливань атомів. Розрахунок розподілу внутрішньої енергії твердого тіла між коливальними процесами різної частоти і просторової довжини хвилі може бути здійснений із використанням статистики Бозе–Ейнштейна або Максвелла–Больцмана для так званого великого канонічного ансамблю нерозрізняваних квазі-часток – фононів – кожній із яких відповідає коливання певної частоти.

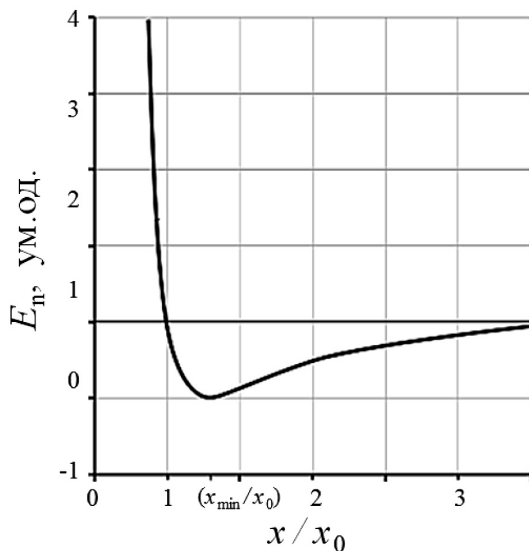
При такому підході до моделювання виникає певний парадокс. Зазвичай наявність достатньої енергії для активації фононів певної частоти і амплітуди трактується як присутність у матеріалі певної кількості атомів із енергією саме такої величини, причому процент цих атомів відповідає ймовірнос-

ті частинками зайняти відповідний енергетичний рівень.

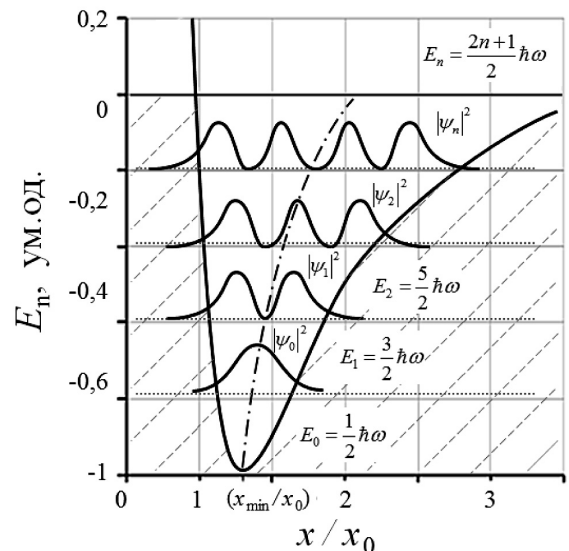
Проте в такому випадку наявна теоретична проблема, так як модель не може пояснити наявність часової залежності реакції матеріалу на навантаження, яка має свій прояв у явищах тривалої міцності і зміцнення матеріалу при зростанні швидкості деформації, адже властивості матеріалу трактуються як стаціонарні у часі.

Вирішення даного парадоксу вбачається у даному дослідженні на основі того, що описане трактування ймовірності зайняти певні енергетичні рівні в матеріалі суперечить принципу ергодичності системи, який, наряду із принципом нерозрізняваності часток (тобто принципу апіорної ймовірності) та принципом максимізації ентропії становить основу статистичної механіки.

Дійсно, відповідно до цього принципу, у випадку розгляду квазі-часток, таких як фонони, що мають нульовий хімічний потенціал додавання частинки у систему, тобто кількість частинок необмежена, насправді мова йде не про кількість фононів певної частоти, а про енергетичні рівні одного і того самого єдиного фонона, а значить просторовий статистичний розподіл ймовірності енергетичних рівнів системи і його еквівалентність середнім по часу значенням відповідних фізичних величин не може мати місце. Тобто ергодичність системи проявляється у просторовому і часовому співвідношенні по простору і часу енергій саме різних фононів, але коли мова йде про фонон заданої частоти, то вихід на різні амплітуди коливань відбувається не одночасно у різних точках матеріалу, а послідовно протягом часу з певною частотою.



а



б

Рис. 1. Залежність енергії взаємодії E_n між двома структурними частками від відносної відстані x_0/x між ними: а – теоретична крива; б – ілюстрація квантово-механічного підходу

Розглянемо теоретичну залежність енергії взаємодії між двома структурними частками від відстані між ними (рис. 1). Кожному енергетичному рівню n фону заданої частоти ω і повної енергії $E_n = (n + 1/2) \times \hbar \times \omega$, де \hbar – стала Планка, $1/2 \times \hbar \times \omega$ – енергія нульового енергетичного рівня, відповідає коливання певної амплітуди. Згідно з ідеалізованою кривою, при певній відстані між частками x_{\min} , спостерігається мінімум потенціальної енергії $E_n(x_{\min}/x_0)$ взаємодії між ними (рис. 1, а). Проте згідно із квантово-механічним підходом хвильова функція $|\psi_n|^2$, яка описує стан мікросистеми, може приймати лише дискретні значення. На рис. 1, б умовно показана кількість локальних мінімумів функції $|\psi_n|^2$ на кожному енергетичному рівні n , яка чисельно рівна n і також чисельно рівна умовній кількості квазічастинок – фононів, які, як це термінологічно позначається, присутні на даному енергетичному рівні.

На рис. 1, б амплітуда коливань визначається по горизонтальній осі і рівна половині ширини ділянки горизонтальної лінії рівня, котра відповідає певному n , обмеженої кривою залежності енергії від відстані. З іншої сторони, при перевищенні амплітудою коливань деякого критичного рівня, так що частка потрапляє в область $x < x_0$, коли $E_n \geq 0$, або в область таких $x \gg x_0$, що $E_n \approx 0$, рівень потенціальної енергії взаємодії часток стає меншим за енергію, необхідну для потраплення однієї із них у сферу впливу інших сусідніх частинок, відповідного додаткового зміщення і пов'язаного із ним незворотного деформування. Так як енергетичні рівні фононів являються дискретними, то і перевищення критичної амплітуди та енергії коливань, яким відповідає виникнення розриву зв'язку, відбувається стрибкоподібно. Відповідно, наявність та відсутність зв'язку між структурними частками матеріалу представляють собою два окремих дискретних стани в процесі еволюції деформування та пошкодження.

Іншим важливим висновком щодо особливостей переходу системи між енергетичними рівнями, яким відповідають коливання зв'язаних часток, і енергетичними рівнями, яким відповідає наявність розриву зв'язку, є те, що на будь-якому з них ймовірність того, що амплітуда, а відповідно і енергія коливання досягне більш високого значення, навіть такого, яке відповідає більш високим енергетичним рівням, є ненульовою. Як показано вище, такі переходи на більш високі енергетичні рівні, зокрема ті, при яких зв'язок виявляється розірваним, відбуваються не постійно але із різними частками матеріалу, а послідовно, раз в певну кількість тактів коливань (адже розглядуваному фону можна поставити у відповідність чітко визначену частоту коливання), проте в усьому об'ємі матеріалу, так як фактично в усьому об'ємі матеріалу при-

сутня єдина квазічастинка, фонон, яким описуються коливання розглядуваної частоти.

Дійсно, додатковим підтвердженням такого трактування являється саме визначення фонона як квазічастинки – це сумісне коливання всього n -вимірного ланцюга взаємодіючих часток. Про його існування можна говорити лише тоді, коли всі вони разом беруть участь у даному коливанні.

Варто відзначити і доцільність розрізнення двох основних типів зв'язків між структурними частками матеріалу, а саме нормальних та дотичних, яким відповідає виникнення відомих з механіки матеріалів і конструкцій основних видів напружень із однойменними назвами, як це було запропоновано і детально розглянуто в [9, 10]. В цьому випадку розрив перших відповідає можливості руйнування деталі на частини, розрив других – можливості формування пластичних деформацій за рахунок ковзання шарів матеріалу, що має свій прояв у вигляді руху дислокацій.

Таке вирішення проблеми дозволяє виділити наступні етапи подальшого моделювання механічної поведінки матеріалу: розрахунок імовірності енергетичних рівнів фононів виділеної частоти; визначення критичних амплітуд, що відповідають розриву зв'язків між атомами; розрахунок імовірностей перевищення критичних амплітуд; розрахунок частоти перевищення критичних амплітуд коливань; розрахунок імовірностей розриву нормальних та дотичних зв'язків; розрахунок імовірностей і частот критичних комбінацій нормальних та дотичних зв'язків, що призводять до тих чи інших типів пошкодження (тут, до речі, можна зробити посилання на широко застосовувану концепцію феноменологічного вирізнення різного типу пошкоджень у композитах [11–14] – короблення, тріщиноутворення, вириву волокон та ін., якій застосування запропонованого ймовірнісного підходу дозволяє, таким чином, надати кількісну оцінку на етапі моделювання, а також, як буде видно із результатів нижче, по розрахунковим величинам спрогнозувати, який із типів пошкодження буде превалювати та перешкоджатиме розвитку інших); розрахунок еквівалентних швидкостей деформацій, що відповідають кожному типу пошкодження; поетапний розрахунок реакції матеріалу на навантаження із паралельним визначенням долі пластичної та так званої дифузної деформації (пошкодження), еквівалентних енергій: потенціальної енергії пружної деформації, пластичної деформації, теплових втрат; розрахунок відповідних напружень; визначення критичних точок незворотного руйнування при перевищенні ймовірності цілісності або відновлення зв'язку ймовірністю його руйнування.

Матеріали і методи

Дослідження було реалізовано у три етапи із переходом від аналізу простого матеріалу без зміцнення, що характеризується виражено пластичною поведінкою, а також незміцненого матеріалу, що характеризується більш крихкою за даних умов проведення досліду поведінкою, до аналізу останнього у якості матриці зміцненого частками металокомпозиту.

Таким чином, на першому етапі моделювання була здійснена спроба спрогнозувати одновісну деформацію розтягу стандартного циліндричного зразка, виконаного із практично чистого металу без застосування зміцнюючих часток. В якості матеріалу розглядався твердий розчин вуглецю у залізі із низьким вмістом вуглецю, а саме ферит, так як властивості фериту наближені до властивостей чистого заліза, а отже, при моделюванні фононних ефектів впливу на міцність матеріалу включеннями вуглецю можна знехтувати. Механічні характеристики матеріалу приведені у табл. 1 [15].

В якості порівняно більш крихкого матеріалу був обраний зразок із литого алюмінієвого сплаву, механічні характеристики якого приведені в табл. 2 [15, 16].

В якості композиційного матеріалу на третьому етапі дослідження був використаний зразок із порошкового композиту, що представляє собою матрицю із алюмінієвого сплаву А359, зміцнену частками карбіду кремнію. Механічні характеристики матеріалу приведені у табл. 3 [17].

Методика проведення чисельного моделювання

Введемо дві еквівалентні відносні швидкості деформації і відповідні їм характерні частоти розриву зв'язків, які враховують сумісний вплив розривів, що виникають як внаслідок поздовжніх коливань (надалі відповідні величини позначені індексом σ), так і внаслідок поперечних коливань (надалі відповідні величини позначені індексом τ). Першим відповідає максимальна можлива швидкість розповсюдження фронту хвильового процесу – швидкість розповсюдження поздовжніх звукових коливань v_c та фононна мода максимальної частоти $\omega_{\max \sigma}$, при якій коливання сусідніх часток відбуваються в протифазі, а тому можливий розрив зв'язків між ними. Другим – відповідно швидкість розповсюдження поперечних звукових хвиль v_t та відповідна максимальна частота протифазної фононної моди $\omega_{\max \tau}$.

Таблиця 1

Механічні характеристики феритного пластичного зразка

	Границя пропорційності	Границя пластичності	Границя руйнування	Модуль Юнга, 10^2 ГПа
Напруження, МПа	184,45	275,60	345	1,085
Відносна деформація, %	0,17	0,37	25	

Таблиця 2

Механічні характеристики алюмінієвого крихкого зразка

	Границя пропорційності	Границя пластичності	Границя руйнування	Модуль Юнга, 10^2 ГПа
Напруження, МПа	283	345	414	0,69
Відносна деформація, %	0,41	0,52	0,98	

Таблиця 3

Механічні характеристики композиційного зразка на основі алюмінію

	Границя пропорційності	Границя пластичності	Границя руйнування	Модуль Юнга, 10^2 ГПа
Напруження, МПа	80	130	245	0,67
Відносна деформація, %	0,12	0,21	1,25	

Періоди відповідних протифазній фононній моді коливань складають:

$$\tau_{\sigma} = \frac{2\pi}{\omega_{\max \sigma}}, \quad \tau_{\tau} = \frac{2\pi}{\omega_{\max \tau}}. \quad (1)$$

Таким чином, близькі між собою за значенням частоти цих коливань

$$f_{\sigma} = \frac{1}{\tau_{\sigma}}, \quad f_{\tau} = \frac{1}{\tau_{\tau}}. \quad (2)$$

Аналогічно до того, як при накладанні близьких за частотою коливань час від часу імпульси практично співпадають за фазою і їх вплив підсумовується, так і в даному випадку виникають процеси, певним чином аналогічні до биття, але які стосуються проте просторово взаємно перпендикулярно направлених коливань. Частота і період прояву сумарного впливу обох імпульсів становлять, таким чином, як відповідно частота і період «биття»:

$$f_{beat} = \frac{f_{\tau} - f_{\sigma}}{2}, \quad \tau_{beat} = \frac{1}{f_{beat}}. \quad (3)$$

Врахуємо, що не при кожній реалізації сумісно-го накладання поздовжніх і поперечних коливань може відбутися їх розрив. Навіть якби мова йшла про накладання однонаправлених коливань, максимальне збільшення амплітуди в два рази далеко не достатнє для забезпечення розриву зв'язку. Спеціально проведені авторами розрахунки і аналіз у порівнянні із експериментальними даними показує, що розрив зв'язків відбувається із критичною ймовірністю q_{σ} для поздовжніх зв'язків та q_{τ_1} і q_{τ_2} для поперечних зв'язків у двох взаємно перпендикулярних напрямках, що відповідають двом поляризаційним площинам поперечних коливань.

В принципі, організоване зміщення рядів атомів чи інших структурних частинок, їх проковзування на відстань, рівну одній чи більше міжатомній відстані, можливе тоді, коли розірваний поздовжній зв'язок, що тримає їх на одній лінії і забезпечує міцність на розрив, та поперечний зв'язок, що перешкоджає зсуву. Отже, ймовірність розриву поздовжнього зв'язку і хоча б одного із поперечних (тобто поперечного хоча б в одному довільному напрямі у поперечній площині чи поперечного перерізу) зв'язків, яку позначимо як ймовірність прояву процесів текучості чи організованої пластичної деформації, складає

$$q_{yield} = q_{\sigma} \& (q_{\tau_1} \parallel q_{\tau_2}), \quad (4)$$

де знак & означає перемноження ймовірностей чи логічне «І», а знак \parallel – додавання ймовірностей чи логічне «АБО».

Прикладом такої організованої пластичної деформації може бути утворення при розтязі зразку

ліній Чернова–Людерса, які, як і передбачається відповідно до розглянутого ймовірнісного підходу і запропонованої гіпотези, мають місце по всій робочій поверхні зразка, а сформований ними візерунок носить регулярний характер, так як процес одночасно охопив фактично всі атоми кристалічної решітки, що втратили в певних момент поздовжній і поперечний зв'язки одночасно, на відміну від традиційного припущення, що процес розриву зв'язків охоплює лише випадковим чином розподілену по матеріалу частину атомів, процент яких визначається б ймовірністю розриву.

Наступним кроком необхідно розрахувати характерний період часу, протягом якого, зважаючи на розраховану вище ймовірність розриву зв'язків, хоча б раз виникають умови для реалізації вказаної організованої пластичної деформації. Отже, це можливо, по-перше, за умови, що максимуми поздовжніх і хоча б одного напрямку поперечних коливань співпадуть за часом, що визначається періодом биття (3), а по-друге, що амплітуди обох цих максимумів будуть достатні не просто для значного відхилення від положення рівноваги, а для перевищення енергією коливань рівня, необхідного для фактичної втрати зв'язку між частинками, що визначається ймовірністю (4). Таким чином, вказаний характерний період часу хоча б однократного створення умов для пластичної деформації складає

$$\Delta t_q^I = \frac{\tau_{beat}}{q_{yield}}. \quad (5)$$

Варто зауважити, що хоча виклад проводиться в термінах фізичних величин, що описують коливання консолідованих часток, як-то період чи амплітуда коливання, проте це являється лише способом опису явища перерозподілу енергії між структурно відокремленими хвильовими процесами, або, іншими словами, між частинками типу атомів, що насправді являються складними утвореннями, які проявляють свої властивості в рамках корпускулярно-хвильового дуалізму. Таким чином, фізична суть розглядуваних явищ – перерозподіл енергії у матеріалі на мікро- та наномасштабному рівні і його просторові та темпоральні особливості, які мають своїм наслідком прояв певних макроскопічно спостережуваних механічних властивостей і механічної міцності матеріалів різного виду.

Також варто зауважити принципову різницю між періодом коливань (3) і характерним періодом часу (4). Перший описує детермінований періодичний процес із поступовим зростанням і зменшенням амплітуд коливань, що послідовно чергуються одне за одним. Другий описує ймовірнісний, не детермінований, стохастичний і випадковий процес розриву зв'язків, який являється наслідком того, що на детермінований процес коливань накладається вплив випадкових флуктуацій енергії. Ці флук-

туації спричинені перерозподілом енергії між окремими фононами, кожен з яких описує коливання певної частоти. Як і в заповненому молекулами ідеального газу резервуарі, так і в умовно заповненому фононними частинками об'ємі матеріалу відповідні частки слабо взаємодіють між собою, проте обмінюються енергією певними порціями, будь-то внаслідок співударяння молекул газу чи внаслідок обміну порціями енергії між фононами різної частоти. Якщо певний фонон отримує підвищену порцію енергії, він переходить на вищий енергетичний рівень, причому, як відомо, енергії цих рівнів квантуються. Перехід єдиного фонуна на певний рівень порядковим номером n іноді термінологічно позначають як появу $(n-1)$ додаткового фонуна тієї ж частоти. В будь-якому випадку фізично це означає зростання амплітуди коливань фізичних структурних частинок матеріалу на даній частоті, яка може перевищити критичну і відбудеться розрив всіх відповідних зв'язків.

При цьому досягнення молекулою певного імпульсу та, відповідно, певної швидкості, чи фононом відповідних коливань умовних імпульсу та швидкості являється випадковою подією, ймовірність якої залежить від багатьох випадкових і незалежних (чи принаймні слабо взаємопов'язаних, так що цим взаємовпливом можна знехтувати) факторів, таких як зіткнення інших молекул чи перерозподіл енергії між іншими фононами. Отже, кожен з цих факторів вносить малий вклад в утворення всієї суми, а значить, розподіл імпульсів та швидкостей часток описується, відповідно до центральної граничної теореми теорії ймовірностей, нормальним гаусовим розподілом, що підтверджується для молекул ідеального газу експериментально, а для фононного газу має місце за визначенням та обґрунтовується теоретично [18].

Оскільки енергія частинки пропорційна сумі квадратів трьох нормально розподілених компонент швидкості, то енергії різних фононів підпорядковуються розподілу χ^2 -квадрат з трьома ступенями свободи як частинному випадку гамма-розподілу. Отже, як обмін енергією між фононами, так і пов'язане з цією енергією руйнування зв'язків між структурними частками матеріалу безпосередньо пов'язані з енергією на одну ступінь свободи, яка, навіть при іншій загальній кількості ступенів свободи відповідно до теореми про рівнорозподіл [19] підпорядковується розподілу χ^2 -квадрат з одним ступенем свободи, що знаходить своє математичне вираження у статистиці Больцмана для густини ймовірності енергії коливань. Так, ймовірність $p(E_n^{\omega})$, що коливання отримає енергію $E_n^{\omega} = n \times \hbar \times \omega_p$, де серед інших допустимих значень частоти коливань ω_i можна розглядати і згадану вище ω_{\max} , n – невід'ємне ціле число, \hbar – стала Планка, складає

$$p(E_n^{\omega}) = \frac{\exp(-\frac{n \cdot \hbar \cdot \omega_i}{k_B \cdot T})}{\sum_{n=0}^{\infty} \exp(-\frac{n \cdot \hbar \cdot \omega_i}{k_B \cdot T})} = \exp(-\frac{n \cdot \hbar \cdot \omega_i}{k_B \cdot T}) \cdot (1 - \exp(-\frac{\hbar \cdot \omega_i}{k_B \cdot T})), \quad (6)$$

де K_B – стала Больцмана, T – температура фононного газу, що має свій еквівалент у температурі матеріалу, наявність якої забезпечується сумарним впливом розглядуваних фононних коливань. В даному випадку розглядається діапазон квантових рівнів $n \in [0; +\infty)$, так як теоретично рівень температурних флуктуацій не обмежений зверху (ймовірності таких флуктуацій надзвичайно низькі). Окремий напрям теоретичного аналізу полягає у врахуванні зміщення вліво вказаного розподілу при врахуванні практичного верхнього рівня температурної флуктуації як максимальної сумарної теплової енергії тіла, що потенційно значно підвищує ймовірності порівняно низько енергетичних флуктуацій, яких проте достатньо для розриву зв'язків у матеріалі і впливу на механічну поведінку.

Повертаючись до рівняння (5), відповідна характерному періоду часу Δt_q^I хоча б однократного створення умов для пластичної деформації еквівалентна відносна швидкість виникнення пов'язаних із особливостями розриву зв'язків умов для формування пластичної деформації $\dot{\epsilon}_{eq}^I$ може бути розрахована наступним чином:

$$\dot{\epsilon}_{eq}^I = \frac{\epsilon_f}{\Delta t_q^I} = \frac{a}{L} \cdot \frac{1}{\Delta t_q^I} = \frac{a}{L} \cdot \frac{q_{yield}}{\tau_{beat}}, \quad (7)$$

де ϵ_f – критична відносна деформація розриву зв'язків, що в даному випадку може бути прийнята рівною такій відносній деформації, що відповідає зміщенню на одну повну міжатомну відстань a при референтній довжині, рівній повній довжині зразка L .

Другу еквівалентну відносну швидкість розриву зв'язків і формування умов для уже так званої дифузного пошкодження чи дифузної деформації, знайдемо подібним чином. По-перше, характерний період часу хоча б однократного створення умов для розриву поздовжніх зв'язків складає

$$\Delta t_{\sigma} = \frac{\tau_{\sigma}}{q_{\sigma}}, \quad (8)$$

де, у відповідності до приведених вище позначень, τ_{σ} – період відповідних протифазних фононних моді $\omega_{\max \tau}$ поздовжніх коливань; q_{σ} – ймовірність розриву поздовжніх зв'язків. Характерний період часу хоча б однократного створення умов для розриву поперечних зв'язків складає

$$\Delta t_{\tau} = \frac{\tau_{\tau}}{(q_{\tau 1} \parallel q_{\tau 2})}, \quad (9)$$

де τ_{τ} – період відповідних протифазній фононній моді $\omega_{\max \tau}$ поздовжніх коливань; $q_{\tau 1}$ і $q_{\tau 2}$ – ймовірності розриву поперечних зв'язків у двох взаємно перпендикулярних напрямках; $(q_{\tau 1} \parallel q_{\tau 2})$ – сумарна ймовірність розриву поперечних зв'язків хоча б у одному із двох взаємно перпендикулярних напрямках.

Відповідні близькі за значенням частоти виникнення умов для розриву поздовжніх і поперечних зв'язків:

$$f_{\sigma}^q = \frac{1}{\Delta t_{\sigma}}, \quad f_{\tau}^q = \frac{1}{\Delta t_{\tau}}. \quad (10)$$

Частоту взаємного накладання імпульсів і відповідно виникнення передумов для сумісного розриву поздовжніх і поперечних зв'язків, як і для (3), знаходимо за аналогією із певним чином подібними до биття процесами, але які стосуються в цьому разі просторово взаємно перпендикулярно направлених розривів зв'язків із урахуванням ймовірностей їх виникнення. Таким чином, частота сумісного виникнення передумов для дифузної деформації:

$$f_{beat}^q = \frac{f_{\tau}^q - f_{\sigma}^q}{2}. \quad (11)$$

В цьому випадку доповідний даній частоті період розривів зв'язків τ_{beat}^q дорівнює характерному періоду часу хоча б однократного створення умов для дифузної деформації Δt_q^{II} :

$$\Delta t_q^{II} = \tau_{beat}^q = \frac{1}{f_{beat}^q} = \frac{2 \cdot \Delta t_{\sigma} \cdot \Delta t_{\tau}}{\Delta t_{\sigma} - \Delta t_{\tau}}. \quad (12)$$

Відповідна характерному періоду часу Δt_q^{II} еквівалентна відносна швидкість виникнення пов'язаних із особливостями розриву зв'язків умов для формування дифузної деформації $\dot{\epsilon}_{eq}^{II}$ може бути розрахована наступним чином:

$$\dot{\epsilon}_{eq}^{II} = \frac{\epsilon_f}{\Delta t_q^{II}} = \frac{a}{L} \cdot \frac{1}{\Delta t_q^{II}} = \frac{2a}{L} \cdot \frac{\Delta t_{\sigma} \cdot \Delta t_{\tau}}{\Delta t_{\sigma} - \Delta t_{\tau}}. \quad (13)$$

Щодо еквівалентних швидкостей пластичної $\dot{\epsilon}_{eq}^I$ і дифузної $\dot{\epsilon}_{eq}^{II}$ деформацій, то із матеріалознавства відомо, що мало того, що енергії деформації перед досягненням текучості мають той самий порядок, що і енергії плавлення відповідних твердих тіл, але і те, що дечим подібні між собою процеси текучості і повзучості відрізняються характером руху дислокацій – при текучості він має організований характер, а при повзучості – так званий дифузний, що спостерігається також на ділянці зміцнення матеріалу після проходження ділянки текучості на стандартній діаграмі розтягу зразків.

Як вбачається із приведених вище рівнянь для розрахунку обох вказаних еквівалентних швидкостей, дійсно, перша із них стосується виникнення фононних флуктуацій розриву зв'язків в коливаннях, при яких всі атоми решітки знаходяться в умовах організованого сумісного коливального процесу. Друга стосується взаємно неузгоджених між собою розривів нормальних і дотичних (поздовжніх і поперечних) зв'язків, при яких зміщення атомів між стаціонарними положеннями в решітці відбуваються, проте подібно до дифузних процесів локально, не супроводжуючись організованим зміщенням всієї атомної площини. Зовні при спостереженні описані процеси проявляються у вигляді руху дислокацій, хоча у їх фізичній основі лежать зумовлені статистичним розподілом флуктуацій енергії розриву і потенційні відновлення міжатомних чи міжмолекулярних зв'язків.

Результати і аналіз розрахунків

Розглянемо залежності швидкостей пластичної і дифузної деформації (тобто деформацій, що є характерними для текучості і повзучості відповідно) від відносної деформації ϵ (рис. 2).

На першому етапі швидкість дифузної деформації пластичного феритного зразка перевищує швидкість пластичної, і дійсно, потенційно атоми можуть взаємно обмінюватись положеннями, проте структура їх взаємного розташування зберігається, пластична деформація практично не має місця. При зростанні значення параметру різниця між еквівалентними швидкостями поступово нівелюється, поступово починають проявлятися пластичні деформації. При досягненні відносною деформацією значення, близького до відносної деформації, при якій досягається границя текучості, еквівалентна швидкість пластичної деформації починає перевищувати еквівалентну швидкість дифузної деформації і прояв текучості набуває переважаючого характеру.

Результати моделювання діаграми розтягу для феритного зразка, отримані на основі розрахунку ймовірнісного руйнування і відновлення зв'язків із використанням співвідношення еквівалентних швидкостей деформації, у порівнянні із експериментальними даними згідно [15], приведені на рис. 3, а. Як видно з графіків, відхилення результатів моделювання від даних експерименту не перевищує 6%.

На рис. 3 пунктирними горизонтальними і вертикальними лініями позначені напруження границі пропорційності та текучості і відповідні відносні деформації. Похилими пунктирними лініями позначені прямо пропорційні залежності, що відповідають закону Гука для відповідних матеріалів.

Виходячи із запропонованого ймовірнісного підходу і сформульованої гіпотези механічна пове-

дінка матеріалу визначається ймовірнісними феноменами взаємодії енергетичних флуктуацій на фоні коливальних процесів у структурі матеріалу, а тому можна пояснити близькість механічних властивостей фериту та чистого заліза тим, що, справді, так як густина включень атомів вуглецю низька, то вони призводять до виникнення лише локальних фононних мод без суттєвого впливу на глобальний пере-

розподіл енергії між частками у досліджуваному зразку.

Аналогічний результат отримано для крихкого алюмінієвого зразка (рис. 2, б, рис. 3, б). В цьому випадку більш різкий перехід від прямо пропорційної залежності до пластичного деформування пояснюється значним перевищенням швидкості $\dot{\epsilon}_{eq}^{II}$ над $\dot{\epsilon}_{eq}^I$ перед критичною точкою перетину кривих.

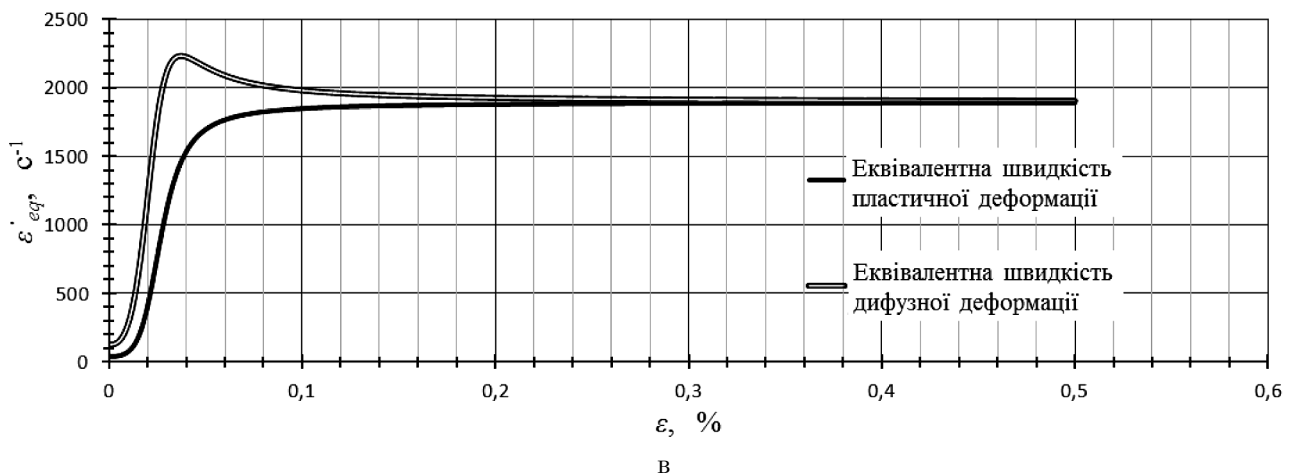
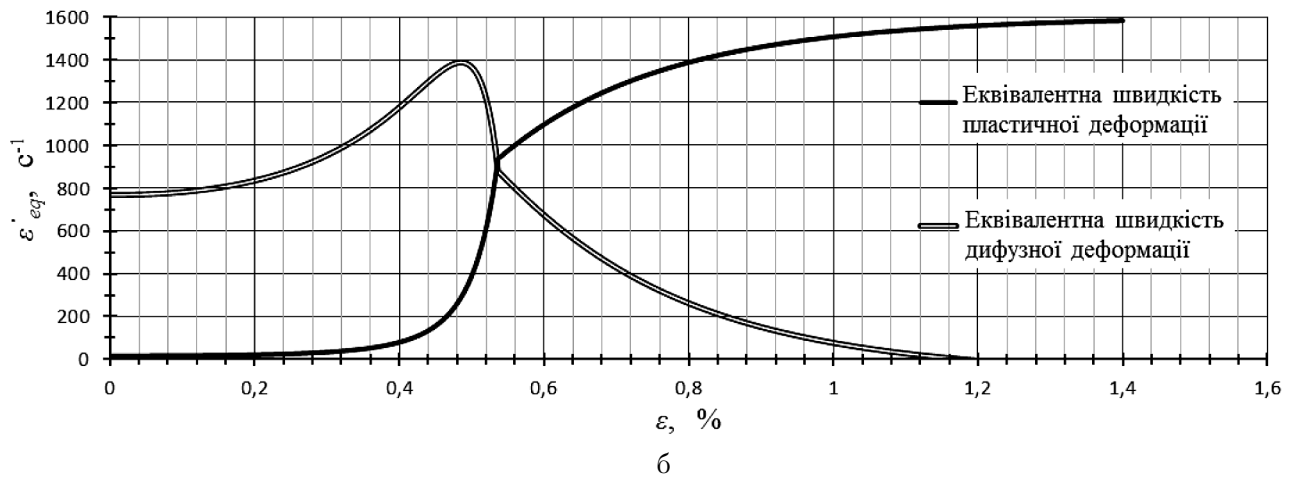
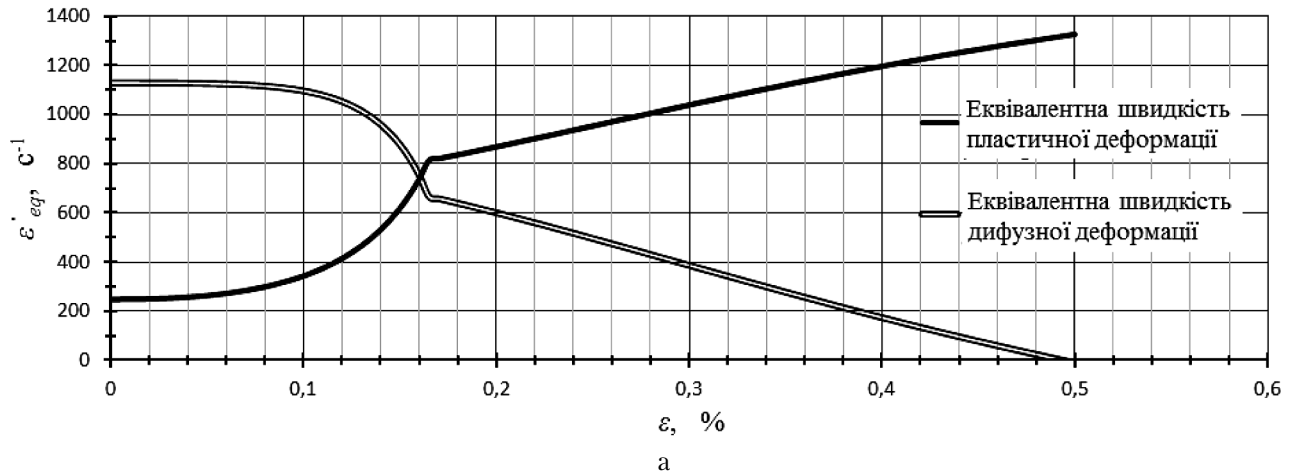


Рис. 2. Еквівалентні швидкості пластичної $\dot{\epsilon}_{eq}^I$ та дифузної $\dot{\epsilon}_{eq}^{II}$ деформації в залежності від відносної деформації ϵ : а – феритний пластичний матеріал; б – крихкий алюмінієвий матеріал; в – порошково-зміцнений композит на основі алюмінію

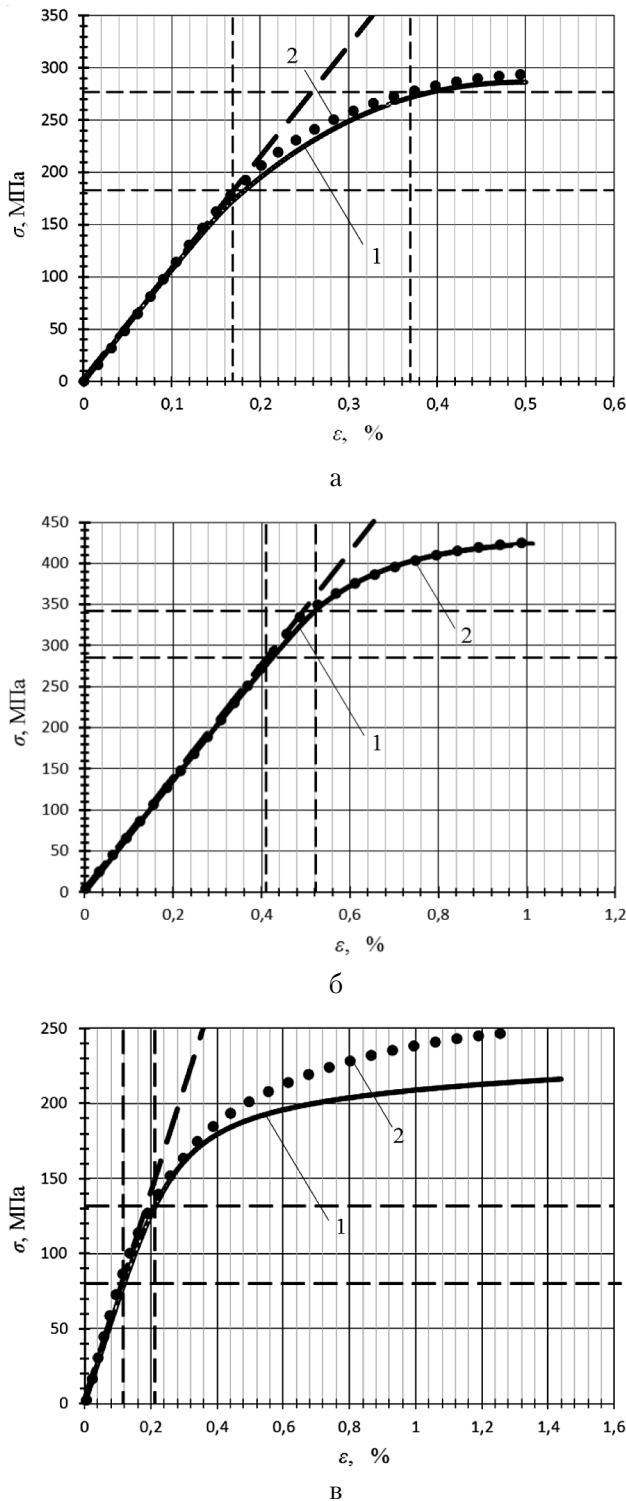


Рис. 3. Залежності напружень від деформацій при квазістатичному розтязі: а – феритний пластичний матеріал; б – крихкий алюмінієвий матеріал; в – порошково-зміцнений композит на основі алюмінію; 1 – модель; 2 – експеримент

Проведені розрахунки дали можливість перейти до моделювання композитів із металевою матрицею (рис. 2, в, рис. 3, в). Для композиту точка руйнування незначно перевищена порівняно із приведеними згідно з [17] результатами експерименту,

але, як вказується у експериментальній роботі, якраз для деформацій понад границю текучості спостерігається значне розсіювання дослідних даних. Таким чином, згідно з теоретичною моделлю причини такого вираженого розсіювання полягають у асимптотичному прямуванні параметру різниці еквівалентних швидкостей до граничного нульового значення (рис. 2, в, діапазон відносної деформації $\epsilon > 0,2\%$), тобто якраз той випадок, коли концентратори і несучільності можуть зіграти ключову роль. В дослідженому діапазоні параметрів при великих деформаціях відхилення зумовленого випадковими чинниками реальної структури експериментальних зразків напруження від теоретично передбаченого складає до 18% (рис. 3, в).

Як видно із рис. 2, в, в даному випадку для композиту відсутня друга характерна для попередніх випадків ділянка, на якій $\dot{\epsilon}_{eq}^I$ перевищує $\dot{\epsilon}_{eq}^{II}$. Отже, у всьому розглянутому діапазоні відносних деформацій деформування носить принципово інший, крихкий характер. Даний теоретичний висновок, отриманий виключно на основі ймовірнісного моделювання, підтверджується експериментальними даними. Дійсно, згідно з приведеними в [17] на рис. 8, мікрофотографіями чітко прослідковуються тяжі пластичної деформації на границях зруйнованої поверхні у випадку алюмінію і виражено крихкий характер без подібних тяжів у випадку зміцненого частками алюмінієвого композиту.

Висновки

Проведене дослідження залежностей напружень від деформацій для трьох конструктивних матеріалів, а саме двох металевих сплавів із мінімальною кількістю структурних включень, а також зміцненого частками карбіду кремнію композиту на основі металевої матриці, показало принципову застосовність запропонованої ймовірнісної моделі розрахунку деформування і пошкодження матеріалу під навантаженням для вказаних випадків. В основі моделювання лежить принцип розрахунку ймовірностей розриву і відновлення силових зв'язків між структурними елементами матеріалу із врахуванням частотних характеристик даних процесів, а також відповідних еквівалентних швидкостей пластичної та дифузної деформації як параметрів, на основі яких здійснюється уточнений термодинамічний розрахунок процесу деформування.

Перевагами розробленої ймовірнісної моделі є можливість практично точного передбачення значень відносної деформації, при яких відбувається перехід від переважно пружного до переважно пластичного деформування, а також принципове визначення того, чи буде взагалі мати місце пластичне деформування. Таким чином, стає можливим на етапі моделювання спрогнозувати не тільки

залежність напружень від деформацій, але і те, супроводжується відхилення даної залежності від закону Гука пластичними незворотними деформаціями чи, навпаки, крихким пошкодженням, тобто утворенням мікротріщин, в той час як інші неушкоджені ділянки зберігають свою початкову внутрішню структуру. Перший випадок реалізовується за умови, що еквівалентна швидкість пластичної деформації перевищує еквівалентну швидкість дифузної деформації, випадок крихкого пошкодження – навпаки. Крім того, встановлено характерні умови, при яких на перший план за значимістю на процес пошкодження виходять випадкові фактори наявності локальних структурних неоднорідностей в матеріалі, а експериментальні дані характеризуються значним розсіюванням значень. Таке явище спостерігається за умов, коли еквівалентну швидкість дифузної і пластичної деформацій приймають близькі одна до одної значення, а отже фізичні процеси руйнування і відновлення зв'язків дозволяють із практично близькою ймовірністю утворення як незворотних поперечних розривів як тріщин, так і дотичних проковзувань шарів матеріалу як механізму пластичної деформації.

Література

- [1] Hu J. Stress analysis and damage evolution in individual plies of notched composite laminates subjected to in-plane loads / J. Hu, K. Zhang, H. Cheng, P. Liu, P. Zou, D. Song // Chin. J. Aeronaut. – 2016. – vol. In Press. – № <http://dx.doi.org/10.1016/j.cja.2016.10.022>. – p. 1–14.
- [2] Crookston J. J. Prediction of elastic behaviour and initial failure of textile composites / J. J. Crookston // Dissertation. – The Univ. of Nottingham. – 2004. – 217 p.
- [3] Paepegem W. Van Modelling damage and permanent strain in fibre-reinforced composites under in-plane fatigue loading / W. Van Paepegem, J. Degrieck // Compos. Sci. Technol. – 2003. – vol. 63. – № 5. – p. 677–694.
- [4] Li N. Micro-macro FE modeling of damage evolution in laminated composite plates subjected to low velocity impact / N. Li, P.H. Chen // Compos. Struct. – 2016. – vol. 147. – p. 111–121.
- [5] Astanin V. V. Impact deformation and fracture of hybrid composite materials / V. V. Astanin, G. O. Shchegel // Strength Mater. – 2011. – vol. 43. – № 6. – p. 615–627.
- [6] Tohei T. Debye temperature and stiffness of carbon and boron nitride polymorphs from first principles calculations / T. Tohei, A. Kuwabara, F. Oba, I. Tanaka // Phys. Rev. B: Condens. Matter. – 2006. – № 73(6). – p. 643041–643047.
- [7] Astanin V. V. Peculiarities of impact damage of textile-reinforced composite materials under high and low impact speeds (in Ukrainian) / V. V. Astanin, O. I. Olefir, G. O. Shchegel, A. O. Olefir // Technological Systems. PJSC «Ukrainian research institute of aviation technology». JSC «Industrial Technologies Co». – 2016. – № 1(74). – p. 34–45.
- [8] Astanin V. V. Numerical simulation of high-speed impact of net-reinforced flexible composites (in Ukrainian) / V. V. Astanin, O. I. Olefir, G. O. Shchegel, A. O. Olefir // Technological Systems. PJSC «Ukrainian research institute of aviation technology». JSC «Industrial Technologies Co». – 2014. – № 4(69). – p. 22–29.
- [9] Astanin V. V. Probabilistic modeling of physical damage processes of fiber-reinforced composite plates under dynamic loading / V. V. Astanin, G. O. Shchegel // Sci. J. of the Ternopil Nat. Techn. Univ. (Mech. and Material Sci.). – 2016. – № 2(82). – c. 7–22.
- [10] Astanin V. V. Numerical realization of probabilistic model of composite material taking into account the damage evolution at high impact velocities / V. V. Astanin, G. O. Shchegel // Sci. J. of the Ternopil Nat. Techn. Univ. (Mech. and Material Sci.). – 2016. – № 3(83). – c. 16–27.
- [11] The predictive capability of failure mode concept-based strength criteria for multidirectional laminates / Failure criteria in fibre-reinforced-polymer composites (The World-Wide Failure Exercise) / R. G. Cuntze, A. Freund. – M. J. Hinton, P. D. Soden, A. S. Kaddour, ed. – Amst.: Elsevier, 2004. – p. 429–489.
- [12] Damage and failure of aerospace composites / Structural health monitoring of aerospace composites / V. Giurgiutiu. – V. Giurgiutiu, ed. – N.Y.: Elsevier Inc. Acad. Press, 2016. – p. 125–175.
- [13] Gude M. Damage evolution of novel 3D textile-reinforced composites under fatigue loading conditions / M. Gude, W. Hufenbach, I. Koch // Compos. Sci. Technol. – 2010. – vol. 70. – № 1. – p. 186–192.
- [14] Gariboldi E. Damage mechanisms at room and high temperature in notched specimens of Al6061/Al2O3 particulate composites / E. Gariboldi, A. Lo Conte // Compos. Sci. Technol. – 2008. – vol. 68. – № 1. – p. 260–267.
- [15] Atlas of stress-strain curves. 2nd ed. / Materials Park: ASM Int., 2002. – 816 p.
- [16] The engineering toolbox. Resources, tools and basic information for engineering and design of technical applications. [Online]. Hyperlink: <http://www.engineeringtoolbox.com/>
- [17] Li Y. The mechanical response of an A359/SiCp MMC and the A359 aluminum matrix to dynamic shearing deformations / Y. Li, K. T. Ramesh, E. S. C. Chin // Mater. Sci. Eng., A. – 2004. – vol. 382. – № 1. – p. 162–170.
- [18] Kittel Ch. Introduction to solid state physics / Ch. Kittel. – St. Johnson, ed. – N.Y.: John Wiley & Sons, 2005. – 680 p.
- [19] Huang K. Statistical mechanics / K. Huang. – N.Y.: John Wiley & Sons, 1987. – 506 p.

Astanin V. V., Olefir O. I., Shchegel G. O., Olefir A. O.

National Aviation University. Ukraine, Kyiv

NUMERICAL SIMULATION OF STRESSES AND DEFORMATIONS OF SIMPLE COMPOSITE ELEMENTS USING PROBABILISTIC APPROACH

The specificity of numerical modeling of simple composite elements on the basis of conceptual theses of probabilistic approach to modeling of stresses and deformations of structural materials under loading is considered. Simulation results for a particle-reinforced metal matrix composite (MMC) and traditional metal structural materials are compared to experimental data. Particular attention is paid to the analysis of equivalent strain rates of plastic deformation and diffuse deformation as parameters that determine the formation of deformative damage of those materials.

Keywords: metal matrix composites; stress-strain curve; probabilistic damage model; equivalent strain rate.

References

- [1] Hu J. Stress analysis and damage evolution in individual plies of notched composite laminates subjected to in-plane loads / J. Hu, K. Zhang, H. Cheng, P. Liu, P. Zou, D. Song // Chin. J. Aeronaut. – 2016. – vol. In Press. – № <http://dx.doi.org/10.1016/j.cja.2016.10.022>. – p. 1–14.
- [2] Crookston J. J. Prediction of elastic behaviour and initial failure of textile composites / J. J. Crookston // Dissertation. – The Univ. of Nottingham. – 2004. – 217 p.
- [3] Paepegem W. Van Modelling damage and permanent strain in fibre-reinforced composites under in-plane fatigue loading / W. Van Paepegem, J. Degrieck // Compos. Sci. Technol. – 2003. – vol. 63. – № 5. – p. 677–694.
- [4] Li N. Micro-macro FE modeling of damage evolution in laminated composite plates subjected to low velocity impact / N. Li, P. H. Chen // Compos. Struct. – 2016. – vol. 147. – p. 111–121.
- [5] Astanin V. V. Impact deformation and fracture of hybrid composite materials / V. V. Astanin, G. O. Shchegel // Strength Mater. – 2011. – vol. 43. – № 6. – p. 615–627.
- [6] Tohei T. Debye temperature and stiffness of carbon and boron nitride polymorphs from first principles calculations / T. Tohei, A. Kuwabara, F. Oba, I. Tanaka // Phys. Rev. B: Condens. Matter. – 2006. – № 73(6). – p. 643041–643047.
- [7] Astanin V. V. Peculiarities of impact damage of textile-reinforced composite materials under high and low impact speeds (in Ukrainian) / V. V. Astanin, O. I. Olefir, G. O. Shchegel, A. O. Olefir // Technological Systems. PJSC «Ukrainian research institute of aviation technology». JSC «Industrial Technologies Co». – 2016. – № 1(74). – p. 34–45.
- [8] Astanin V. V. Numerical simulation of high-speed impact of net-reinforced flexible composites (in Ukrainian) / V. V. Astanin, O. I. Olefir, G. O. Shchegel, A. O. Olefir // Technological Systems. PJSC «Ukrainian research institute of aviation technology». JSC «Industrial Technologies Co». – 2014. – № 4(69). – p. 22–29.
- [9] Astanin V. V. Probabilistic modeling of physical damage processes of fiber-reinforced composite plates under dynamic loading / V. V. Astanin, G. O. Shchegel // Sci. J. of the Ternopil Nat. Techn. Univ. (Mech. and Material Sci.). – 2016. – № 2(82). – c. 7–22.
- [10] Astanin V. V. Numerical realization of probabilistic model of composite material taking into account the damage evolution at high impact velocities / V. V. Astanin, G. O. Shchegel // Sci. J. of the Ternopil Nat. Techn. Univ. (Mech. and Material Sci.). – 2016. – № 3(83). – c. 16–27.
- [11] The predictive capability of failure mode concept-based strength criteria for multidirectional laminates / Failure criteria in fibre-reinforced-polymer composites (The World-Wide Failure Exercise) / R. G. Cuntze, A. Freund. – M. J. Hinton, P. D. Soden, A. S. Kaddour, ed. – Amst.: Elsevier, 2004. – p. 429–489.
- [12] Damage and failure of aerospace composites / Structural health monitoring of aerospace composites / V. Giurgiutiu. – V. Giurgiutiu, ed. – N.Y.: Elsevier Inc. Acad. Press, 2016. – p. 125–175.
- [13] Gude M. Damage evolution of novel 3D textile-reinforced composites under fatigue loading conditions / M. Gude, W. Hufenbach, I. Koch // Compos. Sci. Technol. – 2010. – vol. 70. – № 1. – p. 186–192.
- [14] Gariboldi E. Damage mechanisms at room and high temperature in notched specimens of Al6061/Al2O3 particulate composites / E. Gariboldi, A. Lo Conte // Compos. Sci. Technol. – 2008. – vol. 68. – № 1. – p. 260–267.
- [15] Atlas of stress-strain curves. 2nd ed. / Materials Park: ASM Int., 2002. – 816 p.

- [16] The engineering toolbox. Resources, tools and basic information for engineering and design of technical applications. [Online]. Hyperlink: <http://www.engineeringtoolbox.com/>
- [17] Li Y. The mechanical response of an A359/SiCp MMC and the A359 aluminum matrix to dynamic shearing deformations / Y. Li, K. T. Ramesh, E. S. C. Chin // Mater. Sci. Eng., A. – 2004. – vol. 382. – № 1. – p. 162–170.
- [18] Kittel Ch. Introduction to solid state physics / Ch. Kittel. – St. Johnson, ed. – N.Y.: John Wiley & Sons, 2005. – 680 p.
- [19] Huang K. Statistical mechanics / K. Huang. – N.Y.: John Wiley & Sons, 1987. – 506 p.