

УДК 539.3

РАСЧЕТ ПОЛЕЙ ВНУТРЕННИХ НАПРЯЖЕНИЙ ДЛЯ ПЛОСКОДЕФОРМИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ УПРУГОГО ТЕЛА С ДИСЛОКАЦИЯМИ

О. В. Белай, С. П. Киселев*

Институт автоматки и электрометрии СО РАН, 630090 Новосибирск

* Институт теоретической и прикладной механики СО РАН, 630090 Новосибирск

E-mail: kiselev@itam.nsc.ru

Представлены результаты численных расчетов внутренних напряжений в материале для случая плоской деформации. Показана зависимость распределения напряжений от пространственной структуры дислокаций.

Ключевые слова: внутренние напряжения, деформации, дислокации, упругость.

Известно, что механические характеристики металлов, такие как прочность, пластичность, ползучесть, зависят от внутренних напряжений в материале. Используя закалку материала, можно повышать, а с помощью отжига понижать уровень внутренних напряжений. В связи с этим актуальной задачей является расчет внутренних напряжений. Одним из основных источников внутренних напряжений являются дислокации, число которых в материале может быть очень большим. В настоящей работе для расчета внутренних напряжений, создаваемых дислокациями, используется математическая модель пластичности, построенная на основе калибровочной теории дефектов с учетом диссипации энергии [1].

Рассмотрим задачу об определении напряжений в упругом теле с дислокациями при отсутствии внешних нагрузок для плоскодеформированного состояния. В этом случае уравнения из [1] принимают вид

$$\begin{aligned}
 \alpha_{zx} &= \frac{\partial \beta_{yx}}{\partial x} - \frac{\partial \beta_{xx}}{\partial y}, & \alpha_{zy} &= \frac{\partial \beta_{yy}}{\partial x} - \frac{\partial \beta_{xy}}{\partial y}, \\
 \beta_{xx} + \beta_{yy} &= 0, & (\beta_{xy} + \beta_{yx})/2 &= \varepsilon_{xy}^p, & \beta_{xx} &= \varepsilon_{xx}^p, \\
 \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial y} &= 0, & \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} &= 0, \\
 \sigma_{xx} &= -P + S_{xx}, & \sigma_{yy} &= -P + S_{yy}, & \sigma_{xy} &= S_{xy}, \\
 P &= K(\rho/\rho_0 - 1), & \rho/\rho_0 &= \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}, \\
 S_{ij} &= 2\mu e_{ij}^e, & e_{ij} &= e_{ij}^e + e_{ij}^p, & e_{ij}^p &= \varepsilon_{ij}^p, & ij &= \{xx, yy, xy\}, \\
 e_{xx} &= \varepsilon_{xx} - (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy})/3, & e_{yy} &= \varepsilon_{yy} - (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy})/3, & e_{xy} &= \varepsilon_{xy}, \\
 \varepsilon_{xx} &= \frac{\partial u_x}{\partial x}, & \varepsilon_{yy} &= \frac{\partial u_y}{\partial y}, & \varepsilon_{xy} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right),
 \end{aligned} \tag{1}$$

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Министерства образования Российской Федерации (грант № E02-4.0-224) и Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 04-01-00894).

где α_{zx}, α_{zy} — компоненты тензора плотности дислокаций; β_{ij} — тензор пластической дисторсии; $\varepsilon_{xx}^p, \varepsilon_{xy}^p$ — компоненты тензора пластических деформаций; σ_{ij} — тензор напряжений; P — давление; S_{ij} — девиатор напряжений; K — модуль объемного сжатия; μ — модуль сдвига; ρ — плотность деформированного материала; ρ_0 — плотность недеформированного материала; $\varepsilon_{ij}, \varepsilon_{ij}^p$ — тензоры деформаций и пластических деформаций; $e_{ij}, e_{ij}^e, e_{ij}^p$ — девиаторы деформаций, упругих и пластических деформаций соответственно; u_x, u_y — компоненты вектора перемещений.

Как показано в [2], полные напряжения $\tilde{\sigma}_{ij}$ в материале в плоском случае определяются по формулам

$$\begin{aligned} \tilde{\sigma}_{xx} &= \sigma_{xx} + \sigma'_{xx}, & \tilde{\sigma}_{yy} &= \sigma_{yy} + \sigma'_{yy}, & \tilde{\sigma}_{xy} &= \sigma_{xy} + \sigma'_{xy}, \\ \tilde{\sigma}_{yx} &= \sigma_{yx} + \sigma'_{yx}, & \sigma'_{xx} &= -C \frac{\partial \alpha_{zx}}{\partial y}, & \sigma'_{yy} &= C \frac{\partial \alpha_{zy}}{\partial x}, \\ & & \sigma'_{xy} &= C \frac{\partial \alpha_{zx}}{\partial x}, & \sigma'_{yx} &= -C \frac{\partial \alpha_{zy}}{\partial y}, \end{aligned} \quad (2)$$

где C — константа; σ'_{ij} — самоуравновешенные напряжения, тождественно удовлетворяющие уравнениям равновесия и нулевым граничным условиям. Напряжения σ_{ij} определяются из системы уравнений (1). При отсутствии внешних нагрузок система уравнений (1), (2) должна удовлетворять нулевым граничным условиям на границе тела с нормалью \mathbf{n} :

$$\sigma_{xx}n_x + \sigma_{xy}n_y = 0, \quad \sigma_{yy}n_y + \sigma_{yx}n_x = 0, \quad \alpha_{zx} = \alpha_{zy} = 0. \quad (3)$$

Согласно [1] стационарное состояние тела возможно, если девиатор полных напряжений \tilde{S}_{ij} удовлетворяет неравенству

$$\tilde{S}_{ij}\tilde{S}_{ij} < (2/3)Y_S^2, \quad \tilde{S}_{ij} = \tilde{\sigma}_{ij} - (1/3)\tilde{\sigma}_{xx}\delta_{ij},$$

где Y_S — предел текучести материала. В этом случае внутренние напряжения уравновешиваются “силой сухого трения” [1] $\tilde{S}_{ij} = S_{ij}^r$. При нарушении данного неравенства начинается пластическое течение материала.

Задача об определении внутренних напряжений ставится следующим образом: используя систему уравнений (1), (2) и граничные условия (3), требуется найти полные напряжения $\tilde{\sigma}_{ij}$ при заданном поле плотности дислокаций $\alpha_{zx}(x, y), \alpha_{zy}(x, y)$. Самоуравновешенные напряжения σ'_{ij} легко вычисляются дифференцированием полей α_{ij} . Напряжения σ_{ij} определяются из решения краевой задачи для эллиптической системы уравнений (1) с граничными условиями (3). Решение этой задачи можно разбить на два этапа. На первом этапе из первых трех уравнений системы (1) находятся компоненты тензора дисторсии $\beta_{ij}(x, y)$, затем из остальных уравнений (1) определяются перемещения $u_i(x, y)$, деформации $\varepsilon_{ij}(x, y)$ и напряжения $\sigma_{ij}(x, y)$.

На первом этапе возникает трудность, связанная с тем, что число уравнений меньше числа неизвестных (для определения четырех неизвестных $\beta_{xx}, \beta_{yy}, \beta_{xy}, \beta_{yx}$ в (1) имеется только три уравнения). Следовательно, одну из компонент β_{ij} можно задавать произвольно. Хотя β_{ij} входят в определение девиатора упругих деформаций аддитивно $e_{ij}^e = \varepsilon_{ij} - (\beta_{ij} + \beta_{ji})/2$, тем не менее тензор напряжений $\sigma_{ij} = -P\delta_{ij} + 2\mu e_{ij}^e$ определяется при этом однозначно, поскольку система уравнений (1) инвариантна при калибровочном преобразовании [1]

$$u'_i = u_i + h_i(x_k), \quad \beta'_{ji} = \beta_{ji} + \frac{\partial h_i}{\partial x_j}. \quad (4)$$

При данном калибровочном преобразовании изменяются компоненты вектора перемещений u_i и тензора дисторсии β_{ij} , а компоненты тензоров упругих деформаций $\varepsilon_{ij}^e =$

$(\partial u_i/\partial x_j + \partial u_j/\partial x_i)/2 - (\beta_{ij} + \beta_{ji})/2$, напряжений σ_{ij} и плотности дислокаций α_{ij} остаются неизменными. Компоненты тензора дисторсии $\beta_{ij}(x_k)$ в общем случае определяются с точностью до трех произвольных функций $h_i(x_k)$. Используя указанный произвол, покажем, что тензор дисторсии можно выбрать в виде симметричного тензора $\beta'_{ij} = \beta_{ji}$.

Рассмотрим сначала общий случай. Пусть β'_{ij} — некоторое решение уравнения [1] $\varepsilon_{jsp} \partial \beta'_{pi} / \partial x_s = \alpha_{ji}$, где $\alpha_{ji} = \alpha_{ji}(x_k)$ — заданные функции; $\beta'_{ij} \neq \beta'_{ji}$. Поскольку предполагается, что $\beta_{kk} = 0$, согласно (4) функции $h_i(x_k)$ должны удовлетворять условию $\partial h_k / \partial x_k = 0$. Отсюда следует, что h_i можно представить в виде

$$h_i = -\varepsilon_{ikl} \frac{\partial f_l}{\partial x_k}, \quad (5)$$

где $f_l = f_l(x_k)$ — произвольные функции. Подставляя (5) в уравнения (4), получим

$$\beta_{ji} = \beta'_{ji} + \varepsilon_{ikl} \frac{\partial^2 f_l}{\partial x_k \partial x_j}. \quad (6)$$

Потребуем, чтобы тензор дисторсии был симметричен: $\beta_{ij} = \beta_{ji}$. Используя уравнение (6), получим систему трех уравнений для трех неизвестных функций f_l

$$\varepsilon_{ikl} \frac{\partial^2 f_l}{\partial x_k \partial x_j} - \varepsilon_{jkl} \frac{\partial^2 f_l}{\partial x_k \partial x_i} = \beta'_{ij} - \beta'_{ji}. \quad (7)$$

В плоском случае в уравнениях (5), (6) следует положить $i = 1, j = 2, l = 3$. Тогда будет отлична от нуля одна компонента $f_3(x, y)$, для которой из (7) получим уравнение Пуассона

$$\frac{\partial^2 f_3}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f_3}{\partial y^2} = \omega, \quad (8)$$

где $\omega = \beta'_{xy} - \beta'_{yx}$ — заданная функция координат. Отметим, что f_3 определяются из (8) неоднозначно, так как уравнению (8) удовлетворяет функция $f_3 + f_0$, где f_0 — решение уравнения Лапласа

$$\frac{\partial^2 f_0}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f_0}{\partial y^2} = 0.$$

Таким образом, доказано, что тензор дисторсии можно считать симметричным ($\beta_{xy} = \beta_{yx}$). Указанная выше неоднозначность означает, что если имеется некоторое решение $u_x, u_y, \beta_{xx}, \beta_{xy}, \beta_{yx}$ системы уравнений (1), удовлетворяющее условию $\beta_{xy} = \beta_{yx}$, то согласно (4) решением будет также

$$\begin{aligned} u'_x &= u_x + h_1, & u'_y &= u_y + h_2, & \beta'_{xx} &= \beta_{xx} + \frac{\partial h_1}{\partial x}, & \beta'_{xy} &= \beta_{xy} + \frac{\partial h_2}{\partial x}, \\ \beta'_{yx} &= \beta_{yx} + \frac{\partial h_1}{\partial y}, & h_1 &= -\frac{\partial f_0}{\partial y}, & h_2 &= \frac{\partial f_0}{\partial x}, & h_3 &= 0. \end{aligned}$$

При этом если функция $f_0(x, y)$ удовлетворяет уравнению $\Delta f_0(x, y) = 0$, то компоненты тензора дисторсии будут симметричными: $\beta'_{xy} = \beta'_{yx}$. Калибровка фиксируется заданием функции $f_0(x, y)$ либо компонент тензора дисторсии $\beta_{xx}(x, y), \beta_{xy}(x, y)$, после чего, как показано ниже, перемещения u_x, u_y однозначно определяются из уравнений равновесия (1).

С учетом вышесказанного систему уравнений для определения β_{ij}, e^p_{ij} можно записать в виде

$$\frac{\partial \beta_{xy}}{\partial x} - \frac{\partial \beta_{xx}}{\partial y} = \alpha_{zx}, \quad \frac{\partial \beta_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \beta_{xy}}{\partial y} = -\alpha_{zy}, \quad e^p_{ij} = \beta_{ij}. \quad (9)$$

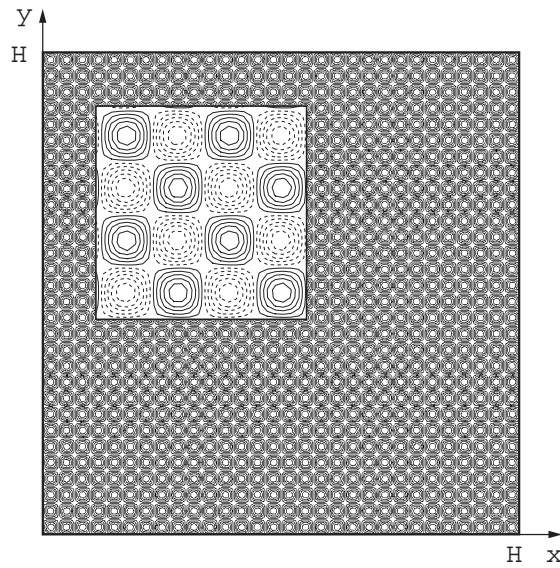


Рис. 1. Расчетная область и изолинии компоненты плотности дислокаций α_{zx} (на увеличенном фрагменте показан внутренний участок: штриховые кривые — отрицательные уровни, сплошные — положительные уровни)

Дифференцируя левую и правую части первых двух уравнений в (9), можно переписать их в виде уравнений Пуассона

$$\frac{\partial^2 \beta_{xx}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \beta_{xx}}{\partial y^2} = -\left(\frac{\partial \alpha_{zx}}{\partial y} + \frac{\partial \alpha_{zy}}{\partial x}\right), \quad \frac{\partial^2 \beta_{xy}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \beta_{xy}}{\partial y^2} = \frac{\partial \alpha_{zx}}{\partial x} - \frac{\partial \alpha_{zy}}{\partial y}. \quad (10)$$

В качестве расчетной области выбирался квадрат (рис. 1), границы которого были свободны от нагрузки ($f_i = \sigma_{ij}n_j = 0$), а компоненты тензора плотности дислокаций α_{ij} на границе полагались равными нулю. Предполагается, что распределение дислокаций в квадрате является неоднородным. Максимумы и минимумы плотности дислокаций находятся в узлах квадратных ячеек и описываются формулами

$$\alpha_{zx} = A_1 \sin kx \sin ky, \quad \alpha_{zy} = A_2 \sin kx \sin ky, \quad kH = 2\pi m. \quad (11)$$

В расчетах полагалось $H = 10^{-2}$ м, $m = 15$, $A_1 = A_2 = 2,72 \cdot 10^2$ м⁻¹, что соответствует скалярной плотности дислокаций $n = 8 \cdot 10^{11}$ м⁻² с вектором Бюргерса $b = 3,4 \cdot 10^{-10}$ м. Распределение дислокаций (11) моделирует поликристаллический материал, в котором дислокации концентрируются на границах квадратных кристаллитов [3]. Суммарный вектор Бюргерса, соответствующий распределению (11), равен нулю. Подставляя соотношения (11) в правую часть уравнений (10), найдем компоненты тензора дисторсии β_{ij} и пластических деформаций ε_{ij}^p :

$$\begin{aligned} \beta_{xx} = \varepsilon_{xx}^p &= (A_2 \cos kx \sin ky + A_1 \sin kx \cos ky)/(2k), \\ \beta_{xy} = \varepsilon_{xy}^p &= (A_2 \sin kx \cos ky - A_1 \cos kx \sin ky)/(2k). \end{aligned} \quad (12)$$

На рис. 2 показаны изолинии дисторсии β_{xy} (пластической деформации ε_{xy}^p), построенные по формулам (12). Распределение компоненты β_{xx} имеет аналогичный вид (с тем лишь отличием, что полосы параллельны сопряженной диагонали, т. е. повернуты на 90°). Видно, что уравнения (12) описывают полосчатую пластическую деформацию, которая приводит к распределению плотности дислокаций в виде квадратной сетки (11).

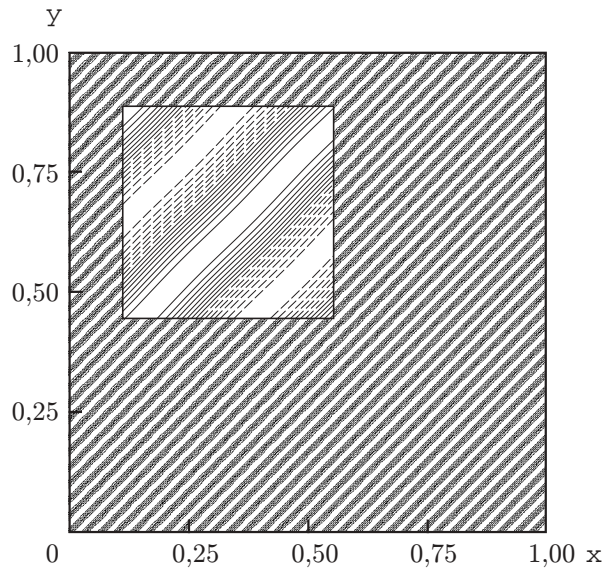


Рис. 2. Изолинии компоненты пластической дисторсии β_{xy} (на увеличенном фрагменте показан внутренний участок; обозначения те же, что на рис. 1)

Выбором компонент тензора дисторсии в виде (12) фиксируется калибровка. Покажем, что при заданных компонентах тензора дисторсии (12) из системы уравнений (1) однозначно определяются перемещения u_x , u_y . Выражая напряжения через перемещения и дисторсии, представим уравнения равновесия, входящие в систему (1), в форме уравнений Навье

$$\Delta u_x + \frac{1}{1-2\nu} \frac{\partial}{\partial x} \operatorname{div} \mathbf{u} = 2 \left(\frac{\partial \beta_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \beta_{xy}}{\partial y} \right), \quad \Delta u_y + \frac{1}{1-2\nu} \frac{\partial}{\partial y} \operatorname{div} \mathbf{u} = 2 \left(\frac{\partial \beta_{xy}}{\partial x} - \frac{\partial \beta_{xx}}{\partial y} \right),$$

где $\Delta = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2$; $\operatorname{div} \mathbf{u} = \partial u_x/\partial x + \partial u_y/\partial y$; ν — коэффициент Пуассона. Видно, что уравнения равновесия в (1) сводятся к уравнениям линейной теории упругости с объемной силой, которая выражается через производные от тензора дисторсии (12) и является однозначной функцией координат. В этом случае справедливы теоремы существования и единственности [4], из которых следует, что для первой краевой задачи перемещения однозначно определяются из системы уравнений (1).

На втором этапе методом установления решались уравнения равновесия в (1). Для этого в них добавлялись инерционные и вязкие члены

$$\rho \frac{\partial^2 u_x}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma_{xx}^0}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{xy}^0}{\partial y}, \quad \rho \frac{\partial^2 u_y}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma_{xy}^0}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yy}^0}{\partial y}, \quad (13)$$

$$\sigma_{ij}^0 = \sigma_{ij} + 2\eta \dot{\epsilon}_{ij}, \quad \dot{\epsilon}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) - \frac{1}{3} \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \delta_{ij}, \quad v_i = \frac{\partial u_i}{\partial t},$$

где величина σ_{ij} определена в (1); η — искусственная вязкость. Система уравнений (13) решалась при фиксированных ϵ_{ij}^p и граничных условиях (3) конечно-разностным методом по схеме “крест” [5]. В результате решение устанавливалось ($v_i \rightarrow 0$, $\partial^2 u_i/\partial t^2 \rightarrow 0$, $\dot{\epsilon}_{ij} \rightarrow 0$) и сходилось к соответствующему решению стационарной задачи ($\sigma_{ij}^0 \rightarrow \sigma_{ij}$). Сходимость решения определялась нормой относительного изменения решения за одну итерацию

$$\delta_i = \|\Delta u_i\|/\|u_i\| = \max_{x,y} |u_i(t+\tau) - u_i(t)|/\max_{x,y} |u_i(t+\tau/2)| < \varepsilon,$$

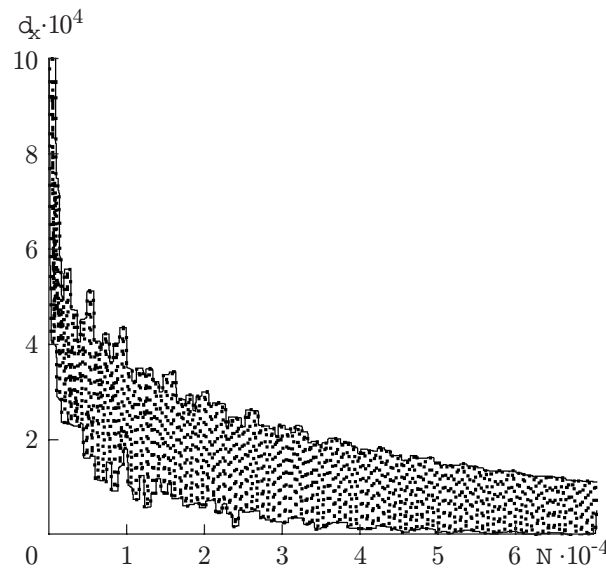


Рис. 3. Зависимость нормы относительной погрешности от номера итерации: точки — расчетные значения; линии — границы разброса расчетных данных

где $\varepsilon \ll 1$ — заданное малое число; τ — шаг по времени; u_i — значения компонент перемещения в узлах разностной сетки.

Численный расчет проводился для алюминия при следующих параметрах: $\rho_0 = 2,7 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$, $K = 7,3 \cdot 10^{10} \text{ Па}$, $\mu = 2,48 \cdot 10^{10} \text{ Па}$, $\eta = 4,23 \cdot 10^2 \text{ Па} \cdot \text{с}$. Во время счета наблюдались затухающие колебания, и решение быстро сходилось к стационарному. Процесс сходимости решения показан на рис. 3. Норма относительного изменения δ_x осциллирует между минимальным $\delta_{x,\min}$ и максимальным $\delta_{x,\max}$ значениями, которые стремятся к нулю с увеличением номера итерации, что обеспечивает сходимость решения: $\delta_x \rightarrow 0$. В расчетах решение считалось установившимся при условии $\max(\delta_x, \delta_y) < 2 \cdot 10^{-4}$.

На рис. 4,а,б приведены рассчитанные изолинии напряжений σ_{xy} и перемещений u_x соответственно. Видно, что перемещения являются суперпозицией полосчатого и “шахматного” распределений. Распределение напряжений σ_{xy} подобно распределению пластической дисторсии β_{xy} . На всех границах квадрата напряжения $\sigma_{xy} = \sigma_{yx} = 0$.

Самоуравновешенные напряжения σ'_{xy} определяются согласно (2), (12):

$$\begin{aligned} \sigma'_{xx} &= -CA_1 k \sin kx \cos ky, & \sigma'_{yy} &= CA_2 k \cos kx \sin ky, \\ \sigma'_{xy} &= CA_1 k \cos kx \sin ky, & \sigma'_{yy} &= -CA_2 k \sin kx \cos ky. \end{aligned} \tag{14}$$

Формулы (14) описывают “шахматное” распределение σ'_{ij} . Полные напряжения согласно (2) определяются по формуле $\tilde{\sigma}_{ij} = \sigma_{ij} + \sigma'_{ij}$. На рис. 4,в показаны изолинии компоненты $\tilde{\sigma}_{xy}$ полных напряжений, построенные при $C = 2,64 \cdot 10^2 \text{ Па} \cdot \text{м}^2$. В работе [6] для константы C предложена формула $C = \mu l_1 l_2$, где l_1 — размер кристаллита; l_2 — расстояние между линиями скольжения. Выбранному значению C соответствуют величина $l_1 = 1/15 \text{ см}$, равная периоду дислокационной структуры, и расстояние $l_2 = 12 \text{ мкм}$.

На рис. 4,в видно, что в отличие от σ_{xy} полные напряжения $\tilde{\sigma}_{xy}$ не обращаются в нуль на левой и правой границах расчетной области. Это связано с характером распределения $\sigma'_{xy}(x, y)$, определяемым третьим уравнением в (14). Амплитуды колебаний $\tilde{\sigma}_{xy}$ и σ'_{xy} для заданного поля дислокаций (11) составляют 1 ГПа и $0,6 \cdot 10^9 \text{ Па}$ соответственно. Интересно отметить, что распределения полных напряжений и перемещений подобны друг другу. Повидимому, это случайное совпадение.

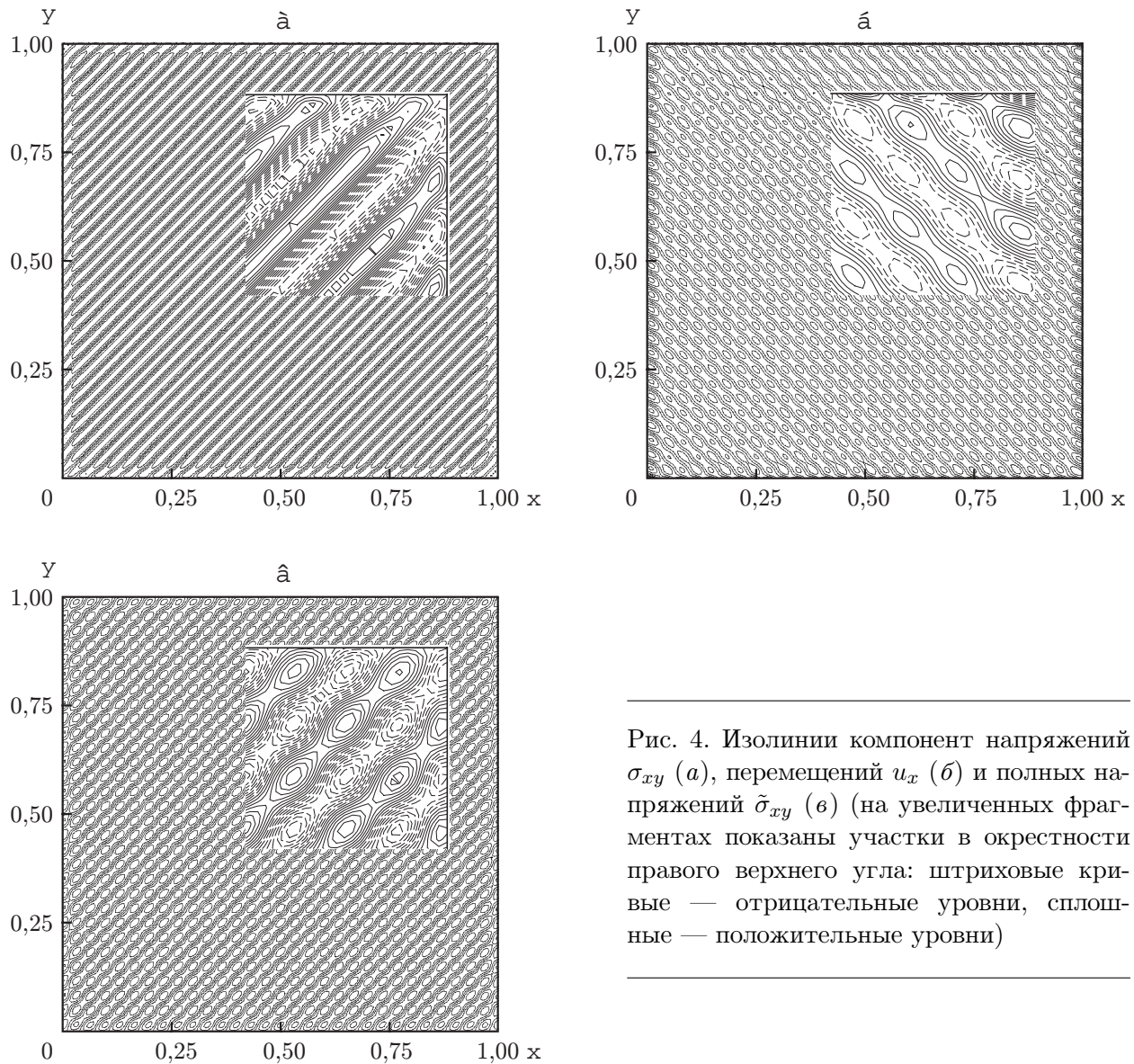


Рис. 4. Изолинии компонент напряжений σ_{xy} (а), перемещений u_x (б) и полных напряжений $\tilde{\sigma}_{xy}$ (в) (на увеличенных фрагментах показаны участки в окрестности правого верхнего угла: штриховые кривые — отрицательные уровни, сплошные — положительные уровни)

Практически во всей области распределение полных напряжений является периодическим и определяется полем дислокаций α_{zx} , α_{zy} . Периодичность нарушается только в узкой полосе вблизи границы за счет влияния нулевых граничных условий. Проведенные расчеты показали, что самоуравновешенные напряжения σ'_{ij} имеют тот же порядок, что и упругие напряжения σ_{ij} , поэтому их необходимо учитывать при расчете полных напряжений $\tilde{\sigma}_{ij}$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Киселев С. П. Модель упругопластического деформирования материалов на основе калибровочной теории дефектов с учетом диссипации энергии // ПМТФ. 2004. Т. 45, № 2. С. 177–187.
2. Киселев С. П. Внутренние напряжения в твердом теле с дислокациями // ПМТФ. 2004. Т. 45, № 4. С. 131–136.
3. Фридель Ж. Дислокации. М.: Мир, 1967.

4. **Хан Х.** Теория упругости. М.: Мир, 1988.
5. **Уилкинс М. Л.** Расчет упругопластических течений // Вычислительные методы в гидродинамике. М.: Мир, 1967. С. 212–263.
6. **Попов В. Л., Слядников Е. Е., Чертова Н. В.** Динамическая калибровочная теория волн в упругопластических средах // Физическая мезомеханика и компьютерное конструирование материалов. Новосибирск: Наука. Сиб. отд-ние, 1995. Т. 1. С. 113–129.

*Поступила в редакцию 16/І 2004 г.,
в окончательном варианте — 1/ІІІ 2004 г.*
