МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

Кафедра прикладної математики та моделювання складних систем

Допущено до захисту Завідувач кафедри ПМ та МСС _____ Коплик І.В.

«___» _____ 2022 p.

КВАЛІФІКАЦІЙНА РОБОТА

на здобуття освітнього ступеня «бакалавр» спеціальність 113 «Прикладна математика» освітньо-професійна програма «Прикладна математика»

тема роботи «МОДЕЛЮВАННЯ ЗМІЦНЕННЯ МЕТАЛІВ ПРИ ІНТЕНСИВНІЙ ПЛАСТИЧНІЙ ДЕФОРМАЦІЇ»

Виконавець

студент факультету ЕлІТ

<u>Горпинченко Максим Олександрович</u> (прізвище, ім'я, по батькові)

(підпис)

Науковий керівник

<u>професор, доктор фіз.-мат. наук</u> (науковий ступінь, вчене звання)

<u>Хоменко Олексій Віталійович</u> (прізвище, ім'я, по батькові)

(підпис)

СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

Факультет	електроніки та інформаційних технологій		
Кафедра	прикладної математики та моделювання складних		
	систем		
Рівень вищої			
освіти	бакалавр		
Галузь знань	11 Математика та статистика		
Спеціальність	113 Прикладна математика		
Освітня	освітньо-професійна «Прикладна математика»		
програма			

ЗАТВЕРДЖУЮ

Завідувач кафедри ПМ та МСС

Коплик I.B. _____

«____» _____2022 p.

ЗАВДАННЯ

НА КВАЛІФІКАЦІЙНУ РОБОТУ ЗДОБУВАЧУ ВИЩОЇ ОСВІТИ

Горпинченко Максим Олександрович

1. Тема роботи: <u>Моделювання зміцнення металів при інтенсивній пластичній</u> <u>деформації</u>

Керівник роботи <u>Хоменко О.В., професор, доктор фіз.-мат. наук</u> затверджено наказом по факультету ЕлІТ від «16» лютого 2022 р. № 0146-VI

- 2. Термін подання роботи студентом: «<u>17</u>» <u>червня</u> 2022 р.
- 3. Вихідні данні до роботи: <u>1) Методи отримання наноструктурних матеріалів;</u> <u>2) Модель нерівноважної еволюційної термодинаміки фрагментації твердих</u> <u>тіл.</u>
- 4.Зміст розрахунково-пояснювальної записки (перелік питань, що їх належить розробити). Моделювання часових залежностей густини дислокацій та меж зерен й впливу останньої на поведінку зовнішніх напружень та пружних деформацій. Написання коду програми.
- 5.Перелік графічного матеріалу
 - 1) Закономірності утворення дефектів при інтенсивній пластичній деформації;
 - 2) Закономірності утворення дефектів при інтенсивній пластичній деформації з нелінійним зв'язком;
 - 3) Криві зміцнення, включаючи вплив меж зерен ковзання;

- 4) Криві зміцнення з нелінійним зв'язком, включаючи вплив меж зерен ковзання;
- 6. Консультанти до проекту (роботи), із значенням розділів проекту, що

стосується їх.

Розділ		Підпис, дата	
	Прізвище, ініціали та посада консультанта	Завдання	Завдання
		видав	прийняв

7. Дата видачі завдання «<u>22</u>» <u>березня</u> 2022 р.

КАЛЕНДАРНИЙ ПЛАН

№ п/п	Найменування роботи, заходи	Термін виконання	Примітка
1	Ознайомитися з типовими методами отримання наноструктурних матеріалів.	24.05 - 26.05	Виконано
2	Проаналізувати літературу за темою: «Модель нерівноважної еволюційної термодинаміки фраґментації твердих тіл».	27.05 - 29.05	Виконано
3	Збудувати математичну модель, яка описує залежність зовнішніх напружень та пружних деформацій від густини меж зерен.	30.05 - 3.06	Виконано
4	Збудувати математичну модель, яка описує залежність зовнішніх напружень та пружних деформацій з нелінійним зв'язком від густини меж зерен.	4.06 - 10.06	Виконано
5	Створити комп'ютерні програми на базі математичної моделі.	20.05 - 23.05	Виконано
6	Побудувати часову залежність густин дефектів, отриманих при чисельному розв'язанні рівнянь, а також закони зміцнення. Зробити таку саму процедуру й для рівнянь з нелінійним зв'язком.	15.06 - 17.06	Виконано

Здобувач вищої освіти

(підпис)

Горпинченко М.О.

Керівник роботи

(підпис)

Хоменко О.В.

РЕФЕРАТ

Кваліфікаційна робота: 26 с., 8 рис., 5 джерел.

Мета роботи: аналіз часових залежностей густини дислокацій та меж зерен й впливу останньої на поведінку зовнішніх напружень та пружних деформацій, модифікувати програмний комплекс отримання результатів дослідження.

Об'єкт дослідження: модель нерівноважної еволюційної термодинаміки фраґментації твердих тіл.

Предмет дослідження: комп'ютерна модель часових залежностей густин дефектів та залежностей пружних деформацій від густини меж зерен.

Методи навчання: принципи отримання наноструктурних матеріалів та методи, які використовуються в нерівноважній термодинаміці та середовищі програмування MATLAB.

Розглянуто комп'ютерну систему, яка розраховує часову залежність густин дефектів та залежність пружних деформацій від густини меж зерен. Досліджено загальну поведінку системи за результатами обчислення моделі.

Проведено експерименти, які досліджували часову залежність зовнішніх напружень та залежність пружних деформацій за різних початкових умов системи. На основі отриманих даних проаналізована поведінка зовнішніх напружень від густини меж зерен. Досліджено поведінку законів зміцнення та вплив нелінійного зв'язку на подальшу їх поведінку.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: ПРУЖНА ДЕФОРМАЦІЯ, ЗОВНІШНІ НАПРУЖЕННЯ, МЕЖА ЗЕРНА, ЗАКОН ЗМІЦНЕННЯ.

3MICT

ВСТУП	6
РОЗДІЛ 1. КІНЕТИКА ІНТЕНСИВНОЇ ПЛАСТИЧНОЇ ДЕФОРМАЦІЇ	7
1.1. Енергетичні основи НЕТ для опису процесів інтенсивної пластичної деформації	7
1.2. Еволюційні залежності дефектів під час процесу ІПД	9
1.3. Вплив нелінійного зв'язку	11
РОЗДІЛ 2. ПРОГРАМНА РЕАЛІЗАЦІЯ МАТЕМАТИЧНОЇ МОДЕЛІ	12
2.1. Закономірності утворення дефектів при ІПД	12
2.2. Закономірності утворення дефектів з нелінійним зв'язком при ІПД	13
2.3. Криві зміцнення, включаючи вплив МЗ ковзання	15
ВИСНОВКИ	19
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	20
ДОДАТОК А	21
ДОДАТОК Б	24

вступ

Внутрішні процеси, що протікають в твердому тілі, є складною картиною взаємних перетворень енергії з одних її видів в інші. Фізична природа внутрішніх процесів в більшості випадків не конкретизується. Дисипація енергії за участю дефектів відрізняється від в'язких каналів, що мають чисто флуктуаційну природу, тим, що релаксація в цьому випадку має динамічний характер. Вона протікає не відразу за допомогою переходу організованої енергії в хаотичну теплову форму, а проходить ряд проміжних рівнів і стадій. Так, при генерації структурних дефектів частина організованої (пружної) енергії йде безпосередньо на їх формування (енергія дефекту або ентальпійна частина енергії дефекту), і разом з тепловим каналом вони утворюють додатковий паралельний канал дисипації. Кінетична частина енергії, що виникла у момент утворення дефекту, спочатку випромінюється у формі низькочастотних коливань і хвиль (акустична емісія), яку можна розглядати як частину загального релаксаційного процесу або як нерівноважну теплову підсистему. Потім ця частина енергії розсіюється на рівноважних теплових коливаннях (хвилях), поповнюючи енергію останніх.

Для розв'язання широкого круга завдань фізичної кінетики була викладена теорія нерівноважної еволюційної термодинаміки (НЕТ). У цьому підході зміна внутрішньої енергії з евристичних міркувань представлялася у формі термодинамічної тотожності, в якій враховувався закон збереження енергії як із зовнішнім оточенням, так і перетворення її на внутрішніх ступенях свободи в процесі релаксації. Тобто в рамках підходу одночасно описуються як процеси енергетичного накачування за рахунок виконуваної роботи і від зовнішніх теплових джерел, так і процеси релаксації.

Релаксація системи здійснюється двома шляхами – зростанням кількості структурних дефектів і продукуванням теплоти (через утворення ентропії) [1-5]. На початковій стадії енергетичного накачування переважає перший процес, що приводить до загального зростання внутрішньої енергії за рахунок дефектності. Це зростання відбуватиметься як за рахунок збільшення густини дефектів, так і за рахунок збільшення середньої енергії дефекту.

РОЗДІЛ 1

КІНЕТИКА ІНТЕНСИВНОЇ ПЛАСТИЧНОЇ ДЕФОРМАЦІЇ

1.1. Енергетичні основи НЕТ для опису процесів інтенсивної пластичної деформації

Розглянемо загальну модель, а саме дворівневу і двохмодову модель з врахуванням внесків меж зерен (МЗ) до четвертої степені відносно густини дефектів:

$$u(h_g, h_D) = u_0 + \sum_{m=g,D} \left(\varphi_{0m} h_m - \frac{1}{2} \varphi_{1m} h_m^2 + \frac{1}{3} \varphi_{2m} h_m^3 - \frac{1}{4} \varphi_{3m} h_m^4 \right) + \varphi_{gD} h_g h_D - \psi_{gD} h_g^2 h_D,$$
(1.1)

де $u_0, \varphi_{km}, \varphi_{gD}, \psi_{gD}$ – коефіцієнти, що залежать від рівноважних змінних s (ентропія) та ε_{ij}^e (пружна деформація) як від керуючих параметрів:

$$u_0 = \frac{1}{2}\lambda(\varepsilon_{ij}^e)^2 + \mu(\varepsilon_{ij}^e)^2,$$
 (1.2)

$$\varphi_{0m} = \varphi_{0m}^* + g_m \varepsilon_{ii}^e + \left(\frac{1}{2}\bar{\lambda} \left(\varepsilon_{ij}^e\right)^2 + \bar{\mu} \left(\varepsilon_{ij}^e\right)^2\right), \tag{1.3}$$

$$\varphi_{1m} = \varphi_{1m}^* - 2e_m \varepsilon_{ii}^e, \tag{1.4}$$

де λ , μ - пружні постійні бездефектного матеріалу; константа g_m - відповідає за генерацію дефектів при $\varepsilon_{ij}^e > 0$ (прикладаються зусилля, що розтягують), а при $\varepsilon_{ij}^e < 0$ (здійснюється процес стиснення) він характеризує анігіляцію або придушення генерації дефектів; $\bar{\lambda}_m, \bar{\mu}_m$ – пружні постійні, зумовлені існуванням дефектів; e_m - характеризує генерацію дефектів при позитивному значенні $\varepsilon_{ij}^e > 0$, а при негативному $\varepsilon_{ij}^e < 0$ - мається на увазі анігіляція; $\varepsilon_{ii}^e, (\varepsilon_{ij}^e)^2 = \varepsilon_{ij}^e \cdot \varepsilon_{ji}^e$ - перші два інваріанти тензора деформацій [3].

Зміна об'єму та форми твердого тіла під впливом прикладених сил визначається тензором деформації. Оскільки вивчається зміна структурної будови в об'ємних зразках, тому розглядається тензор 2-го рангу, який складається з 9 компонент та 3 напрямів. Однак, при вивченні напружено деформованого стану, як в представленому дослідженні зазвичай використовують інваріанти ε_{ij}^{e} , тобто деякі комбінації компонент тензора, які не змінюють значення при повороті осей. Перший інваріант ε_{ii}^{e} , з фізичного погляду, це об'ємна деформація чи відносна зміна обсягу. В представлених розрахунках беруться негативні значення ε_{ij}^{e} , оскільки при інтенсивній пластичній деформації (ІПД) реалізується процес стиснення матеріалу, що деформується. Значення другого інваріанту (ε_{ij}^{e})² є керуючими параметрами, які становлять зовнішній вплив, і покладаються константами. Індекс D відноситься до дислокацій, а індекс g – до меж зерен.

Поліном четвертого степеню в дужках при додатних значеннях коефіцієнтів φ_{km} може мати дві моди. Мода, яка відповідає меншому значенню дефектності, може описувати випадковий (однорідний) розподіл дислокацій, у разі дислокацій. Мода, яка відповідає більшому значенню дефектності, описуватиме дислокації, що належать комірчастій структурі. Ми розглянемо лише спрощений випадок однорідного розподілу дислокацій, тому при описі еволюції дислокацій, нехтуватимемо старшими степенями ($\varphi_{2D} = 0, \varphi_{3D} = 0$).

Зазначимо, що в рамках аналізованої теорії НЕТ значення пластичних деформацій не представлені у явному вигляді, які власне, і призводять до встановлення нанокристалічних структур у матеріалі за впливу ІПД. Однак вони фігурують у прихованій формі. Відомо, що за постійної швидкості деформування накопичена пластична деформація пропорційна до часу, а при змінній швидкості деформування монотонно залежить від часу. Тому в механіці прийнято замість часу використати накопичену деформацію (мертвий час). У представленій тут теорії час використовується у явній формі, а пластична деформація присутня неявно, у формі щільності дефектів.

Для всіх поданих нижче розрахунків запропонований наступний набір параметрів та коефіцієнтів:

$$\begin{split} \varphi_{0g}^{*} &= 5 \cdot 10^{-2} \ \text{Дж} \cdot \text{M}^{-2}, g_{g} = 9.1 \ \text{Дж} \cdot \text{M}^{-2}, \bar{\lambda}_{g} = 960 \ \text{Дж} \cdot \text{M}^{-2}, \bar{\mu}_{g} = 105 \ \text{Дж} \cdot \text{M}^{-2}, \\ \varphi_{1g}^{*} &= 3.3 \ \text{Дж} \cdot \text{M}^{-1}, e_{g} = 15.5 \ \text{Дж} \cdot \text{M}^{-1}, \varphi_{2g} = 6.5 \ \text{Дж}, \varphi_{3g} = 2.88 \ \text{Дж} \cdot \text{M}, \\ \varphi_{0D}^{*} &= 5 \cdot 10^{-3} \ \text{Дж} \cdot \text{M}^{-1}, g_{D} = 33.1 \ \text{Дж} \cdot \text{M}^{-1}, \bar{\lambda}_{D} = 96 \ \text{Дж} \cdot \text{M}^{-1}, \bar{\mu}_{D} = 10.5 \ \text{Дж} \cdot \text{M}^{-1}, \\ \varphi_{1D}^{*} &= 0.6 \ \text{Дж} \cdot \text{M}, e_{D} = 1.55 \ \text{Дж} \cdot \text{M}, \varphi_{gD} = 0.3 \ \text{Дж}, \psi_{gD} = 10^{-23} \ \text{Дж} \cdot \text{M}. \end{split}$$

Фізична інтерпретація введених у аналізовану модель коефіцієнтів і параметрів має особливе значення щодо процесів фрагментації об'ємних зразків. Більшість

параметрів є фенологічними, тому що досить важко ввести всілякий облік внутрішньо протікаючих взаємодій та встановити реальні розмірності представлених величин.

Перші доданки у співвідношенні (1.3) φ_{0m}^* представляють якусь власну енергію дефектів при відсутності інших впливів, їх поверхнева енергія є мінімально можливою по відношенню до всієї енергії поверхні матеріалу. Також, якийсь коефіцієнт φ_{gD} характеризує взаємодію дефектів.

1.2. Еволюційні залежності дефектів під час процесу ІПД

Еволюція нерівноважних доданків термодинамічного потенціалу задається системою диференціальних рівнянь [2]:

$$\tau_{h_D} \frac{\partial h_D}{\partial t} = \varphi_{0D} - \varphi_{1D} h_D + \varphi_{gD} h_g, \qquad (1.5)$$

$$\tau_{h_g} \frac{\partial h_g}{\partial t} = \varphi_{0g} - \varphi_{1g} h_g + \varphi_{2g} h_g^2 - \varphi_{3g} h_g^3 + \varphi_{gD} h_D.$$
(1.6)

Існує кілька методів знаходження рішень цієї еволюційної системи (1.5,1.6). Так, одним із них є метод адіабатичного наближення, в якому передбачається, що

одна зі змінних слідує за змінами іншого параметра під час аналізованого процесу. Даний метод є наближеним, у зв'язку з цим будемо чисельно розраховувати тимчасові релаксаційні залежності спільно з урахуванням чисельного вирішення системи диференціальних рівнянь (1.5,1.6) щодо всіх змінних. Тим самим підтверджувати правомірність «гіпотези» про адіабатичного наближення для цієї моделі. Проводячи використання аналітичний аналіз стаціонарних станів представленої системи дефектів (1.5, 1.6):

$$\varphi_{0D} - \varphi_{1D}h_D + \varphi_{gD}h_g = 0, \qquad (1.7)$$

$$\varphi_{0g} - \varphi_{1g}h_g + \varphi_{2g}h_g^2 - \varphi_{3g}h_g^3 + \varphi_{gD}h_D = 0.$$
(1.8)

Можна легко побачити, що рівняння (1.7) є лінійним щодо щільності дефектів, та отже, поклавши $\varphi_{gD} = 0$ воно матиме один розв'язок. Друге рівняння (1.8) є кубічним і при $\varphi_{gD} = 0$ може мати три різні корені, 2 з яких можуть відповідати стійким стаціонарним станам (максимум термодинамічного

потенціалу). Причому, як відомо з основної теореми алгебри, принаймні один корінь є речовим, а два інших можуть бути як речовими (можливий випадок кратності), так і парою комплексно-спряжених рішень.

Можливість встановлення різних стійких станів для одного типу дефектів визна-

чається самим процесом деформування та ініціювальним мікроскопічним механізмом взаємодії. Наприклад, розглядаючи зерна, збільшення протяжності границь зерен є продуктивним механізмом дисипації енергії. Однак, після досягнення середнього розміру зерен близько 100 нм інші дефекти, наприклад, потрійні стики, які можна не поділяючи розглядати одночасно із зернами, впливають на сумарний внесок енергії меж, що, власне, і може призвести до формування інших стаціонарних станів.

Розглянемо випадок адіабатичного наближення $\tau_{h_g} \gg \tau_{h_D}$, коли щільність дислокацій слід за еволюцією щільностей меж зерен. В результаті, поклавши $\tau_{h_D} = 0$, отримуємо стаціонарне рівняння для густини дислокацій:

$$h_D = \frac{\varphi_{gD}}{\varphi_{1D}} h_g + \frac{\varphi_{0D}}{\varphi_{1D}} \,. \tag{1.9}$$

При розв'язку системи, щільність відповідного типу дефекту повинна сходитися до отриманого стаціонарного рішення (1.9), що підтверджує стійкість рішення.

Підставляючи вираз (1.9) у рівняння (1.6) отримуємо рівняння Ландау-Халатнікова:

$$\tau_{h_g} \frac{\partial h_g}{\partial t} = \frac{\partial V}{\partial h_g}.$$
(1.10)

Явний вигляд якого представлений співвідношенням:

$$\dot{h_g} = \varphi_{0g} + \varphi_{gD} \frac{\varphi_{0D}}{\varphi_{1D}} - \left(\varphi_{1g} - \frac{\varphi_{gD}^2}{\varphi_{1D}}\right) h_g + \varphi_{2g} h_g^2 - \varphi_{3g} h_g^3.$$
(1.11)

Права частина рівняння (1.11) представляє певну термодинамічну силу $\frac{\partial V}{\partial h_g} \equiv F(h_g)$, яка прагне привести параметр h_g до деякого притягуючого атрактора, який відповідає стійкому рішенню.

Зазначимо, що встановлення першого максимуму термодинамічного потенціалу $V(h_g) = \int_0^{h_g} F(h'_g) dh'_g$ безпосередньо залежить від прикладених напруг, тоді як другий не є чутливим до значень першого та другого інваріантів тензора деформації. Це пов'язано з точністю обліку пружних деформацій у статечному поданні внутрішньої енергії (1.1) - (1.4). Розглянуті деформації введені лише до 2-го ступеня відповідних щільностей дефектів h_m , вплив яких, більшою мірою, впливає на формування першого максимуму. Такий облік було здійснено через збереження приблизно однакового порядку у всьому співвідношенні для внутрішньої енергії (1.1). Сумарний порядок перших двох вкладів за щільністю дефектів h_m та за пружними деформаціями ε_{ii}^e (ε_{ij}^e)² приблизно дорівнює порядку останніх двох, у яких облік деформації не здійснюється. Однак, якщо експеримент покаже велику чутливість другого максимуму до пружних деформацій, таку поведінку можна врахувати вищими ступенями наближення по ε_{ii}^e та (ε_{ij}^e)² у коефіцієнтах h_m^3 і h_m^4 , які представлені у співвідношенні для внутрішньої енергії (2).

1.3. Вплив нелінійного зв'язку

Оскільки нелінійний зв'язок добре підходить для математичного опису фізичних процесів, які ми досліджуємо, на процес утворення стаціонарних конструкцій [4.]. Набір еволюційних рівнянь для параметри стану:

$$\tau_{h_D} \frac{\partial h_D}{\partial t} = \varphi_{0D} - \varphi_{1D} h_D + \varphi_{gD} h_g - \psi_{gD} h_g^2, \qquad (1.12)$$

$$\tau_{h_g} \frac{\partial h_g}{\partial t} = \varphi_{0g} - \varphi_{1g} h_g + \varphi_{2g} h_g^2 - \varphi_{3g} h_g^3 + \varphi_{gD} h_D - 2\psi_{gD} h_g h_D, \qquad (1.13)$$

де τ_{h_m} - час релаксації (обернено пропорційні значення до кінетичних коефіцієнтів). Стохастичні додавання присутні у правих частинах рівнянь. Вони імітують нелінійний зв'язок, який впливає на основні параметри.

РОЗДІЛ 2

ПРОГРАМНА РЕАЛІЗАЦІЯ МАТЕМАТИЧНОЇ МОДЕЛІ

2.1. Закономірності утворення дефектів при ІПД

Потрібно розв'язати диференціальні рівняння (1.5 - 1.6) відносно h_g та h_D

$$\tau_{h_D} \frac{\partial h_D}{\partial t} = \varphi_{0D} - \varphi_{1D} h_D + \varphi_{gD} h_g,$$

$$\tau_{h_g} \frac{\partial h_g}{\partial t} = \varphi_{0g} - \varphi_{1g} h_g + \varphi_{2g} h_g^2 - \varphi_{3g} h_g^3 + \varphi_{gD} h_D$$

Поділимо дані рівняння на τ_{h_D} для першого, та τ_{h_g} для другого и запишемо як $\gamma_D = \frac{1}{\tau_{h_D}}$, а для $\tau_{h_g} - \gamma_g = \frac{1}{\tau_{h_g}}$, отримуємо:

$$\frac{\partial h_D}{\partial t} = \gamma_D \big(\varphi_{0D} - \varphi_{1D} h_D + \varphi_{gD} h_g \big), \tag{2.1}$$

$$\frac{\partial h_g}{\partial t} = \gamma_g \Big(\varphi_{0g} - \varphi_{1g} h_g + \varphi_{2g} h_g^2 - \varphi_{3g} h_g^3 + \varphi_{gD} h_D \Big). \tag{2.2}$$

Початкові параметри:

$$\varphi_{0D}^* = 5 \cdot 10^{-9} \, \text{Дж} \cdot \text{м}^{-1}, \varphi_{1D}^* = 10^{-24} \, \text{Дж} \cdot \text{м}, \varphi_{gD} = 10^{-16} \, \text{Дж},$$

 $\varphi_{0g}^* = 0.4 \, \text{Дж} \cdot \text{м}^{-2}, \varphi_{1g}^* = 3 \cdot 10^{-6} \, \text{Дж} \cdot \text{м}^{-1}, \varphi_{2g} = 5.6 \cdot 10^{-13} \, \text{Дж},$
 $\varphi_{3g} = 3 \cdot 10^{-20} \, \text{Дж} \cdot \text{м}, \gamma_D = 5 \cdot 10^{25} \, \text{Дж} \cdot \text{м} \cdot \text{с}, \gamma_g = 10^6 \, \text{Дж} \cdot \text{м}^{-1} \cdot \text{c}$

Розв'язок диференціальних рівнянь методом Рунге-Кутти зобразимо у вигляді графіків залежності $h_g(t)$ та $h_D(t)$:



Рис.2.1. - Закономірності утворення дефектів при ПІД: кінетика дефектів $h_g(t)$.



Рис.2.2. - Закономірності утворення дефектів при ШД: кінетика дефектів $h_D(t)$. Дислокації виходять на своє стаціонарне значення раніше. У області, де густина МЗ змінюється найшвидше в поведінці густини дислокацій, спостерігається деякий перетин, який свідчить про істотну взаємодію обох видів дефектів між собою в цій області.

З рис. 2.2 видно, що зростання густини дислокацій на початковому етапі грає роль своєрідного «детонатора» для зростання МЗ. На останньому етапі, навпаки, кількість МЗ продовжує зростати, в той же час цей процес значно сповільнюється.

2.2. Закономірності утворення дефектів з нелінійним зв'язком при

ΙΠД

Потрібно розв'язати диференціальні рівняння (1.12, 1.13) відносно h_g та h_D

$$\tau_{h_D} \frac{\partial h_D}{\partial t} = \varphi_{0D} - \varphi_{1D} h_D + \varphi_{gD} h_g - \psi_{gD} h_g^2,$$

$$\tau_{h_g} \frac{\partial h_g}{\partial t} = \varphi_{0g} - \varphi_{1g} h_g + \varphi_{2g} h_g^2 - \varphi_{3g} h_g^3 + \varphi_{gD} h_D - 2\psi_{gD} h_g h_D.$$

Поділимо дані рівняння на au_{h_D} для першого, та au_{h_g} для другого и запишемо як

$$\gamma_{D} = \frac{1}{\tau_{h_{D}}}, \text{ а для } \tau_{h_{g}} - \gamma_{g} = \frac{1}{\tau_{h_{g}}}, \text{ отримуємо:}$$
$$\frac{\partial h_{D}}{\partial t} = \gamma_{D} (\varphi_{0D} - \varphi_{1D}h_{D} + \varphi_{gD}h_{g} - \psi_{gD}h_{g}^{2}), \tag{2.3}$$

$$\frac{\partial h_g}{\partial t} = \gamma_g \Big(\varphi_{0g} - \varphi_{1g} h_g + \varphi_{2g} h_g^2 - \varphi_{3g} h_g^3 + \varphi_{gD} h_D - 2 \psi_{gD} h_g h_D \Big).$$
(2.4)

Початкові параметри:

$$\varphi_{0D}^* = 5 \cdot 10^{-9} \, \text{Дж} \cdot \text{M}^{-1}, \varphi_{1D}^* = 10^{-24} \, \text{Дж} \cdot \text{м}, \varphi_{gD} = 10^{-16} \, \text{Дж},$$

 $\varphi_{0g}^* = 0.4 \, \text{Дж} \cdot \text{M}^{-2}, \varphi_{1g}^* = 3 \cdot 10^{-6} \, \text{Дж} \cdot \text{M}^{-1}, \varphi_{2g} = 5.6 \cdot 10^{-13} \, \text{Дж},$
 $\varphi_{3g} = 3 \cdot 10^{-20} \, \text{Дж} \cdot \text{M}, \gamma_D = 5 \cdot 10^{25} \, \text{Дж} \cdot \text{M} \cdot \text{c}, \gamma_g = 10^6 \, \text{Дж} \cdot \text{M}^{-1} \cdot \text{c},$
 $\psi_{gD} = 10^{-23} \, \text{Дж} \cdot \text{M}.$

Розв'язок диференціальних рівнянь методом Рунге-Кути зобразимо у вигляді графіків залежності $h_g(t)$ та $h_D(t)$:



Рис.2.3. - Закономірності утворення дефектів при ІПД: кінетика дефектів $h_g(t)$ з



Рис.2.4. - Закономірності утворення дефектів при ІПД: кінетика дефектів $h_D(t)$ з нелінійним зв'язком.

Як бачимо, що залежність від часу має вигляд монотонно наростаючої кривої, на якій практично відсутні різкі зміни або коливання. У даному модельному прикладі дислокації мають досить різкий перехід від низьких значень густини на початку процесу ІПД [4] до вищих значень, що відповідає структурно-фазовому переходу. В той же час густина МЗ продовжує зростати, навіть після досягнення дислокаціями стаціонарного значення.

2.3. Криві зміцнення, включаючи вплив МЗ ковзання

Як відомо, закон зміцнення є наслідком зменшення рухливості дислокацій за рахунок гальмування різними дефектами, так само і дислокаціями з інших площин ковзання. На дислокаційному рівні закон зміцнення описується співвідношенням Тейлора

$$\tau = \alpha \mu b \sqrt{h_D},\tag{2.5}$$

де τ - напруження зсуву, α - коефіцієнт, що приймає значення в інтервалі [0.2,1.0], μ – модуль зсуву для бездефектного твердого тіла, **b** – вектор Бюргерса, h_D – щільність дислокацій. Цей закон інколи записують у формі, яка враховує неоднорідність розподілу дислокацій. Для цього у виразі (2.5) додається ще один коефіцієнт Кекучи η , який є великим для однорідного розподілу.

Коефіцієнт Кекучи має сенс враховувати лише у тому випадку, коли, окрім M3 і дислокацій, в твердому тілі виникають по суті проміжні між ними структурні дефекти – комірчаста структура. Але в цьому випадку природніше врахувати цей рівень явно, додавши ще одне кінетичне рівняння до розгляду або додатковою модою. Якщо M3 формуються безпосередньо за рахунок виходу на них дислокацій, то в цьому випадку можна обмежитися співвідношенням (2.5), а закон Холла – Петча на зернистому структурному рівні отримати як простий наслідок із співвідношення (2.5), яке діє на дислокаційному структурному рівні.

У теорії НЕТ керувальним параметром є пружна деформація, яка в разі деформації зсуву пов'язана з напруженням простою залежністю $\tau = \mu \varepsilon^{e}$ так, що закон зміцнення в термінах теорії матиме вигляд:

$$\varepsilon^e = \alpha b \sqrt{h_D}.$$
(2.6)

У законі зміцнення (13.6) для розрахунків прийнято $\alpha = 0.1$ і b = 2.75 нм, що є близьким до реальних значень.

Для вивчення закону зміцнення на зернистому рівні має сенс вивести графік залежності пружних деформацій від густини МЗ, тобто від зворотної величини середнього розміру зерна (рис. 2.5). На цій залежності досить чітко спостерігається стадійність процесу деформації. Різні частини кривої залежності можуть бути апроксимовані різним законом зміцнення. На початковій стадії закон зміцнення збігається із законом Холла – Петча, якщо його виразити через пружні деформації:

$$\varepsilon^e = \varepsilon^{e0} - A\sqrt{h_D},\tag{2.7}$$

де константи $\varepsilon^{e0} = 0,075$ і A = 0,119 мм. Від'ємний знак узятий у зв'язку з тим, що при стискуванні, тобто в типових для ІПД умовах, пружна деформація є величиною від'ємною. Як видно з рис. 2.5, діапазон зміни пружної деформації лежить в межах 0.1 – 0.5 %, що з урахуванням значення зсувного модуля знаходиться в області значень для реальних матеріалів. Закон зміцнення може бути апроксимованим лінійною залежністю

$$\varepsilon^e = \varepsilon^{e1} - B\sqrt{h_D} \tag{2.8}$$

з константами $\varepsilon^{e1} = 0,27$ і B = 0,0059 мм².

Цікаво з'ясувати вплив меж зерен на ковзання у вище зазначених закономірностях. Для цього потрібно приймати більш реалістичні (і складні) базові співвідношення (2.5) і (2.6), в тому числі послаблюючий ефект ковзання

$$\varepsilon^e = \alpha b \sqrt{h_D} - w h_g, \qquad (2.9)$$

де *w* - коефіцієнт послаблення за рахунок ковзання меж зерен. У ході розв'язку та побудови моделі з'ясувалося, що праву частину формули (2.9) треба брати з від'ємним знаком, щоб врахувати стиснення матеріалу [5].

Можна зробити висновок, що найбільше зміцнення матеріал отримує саме на останній стадії процесу ІПД [1]. З цього можна зробити практичну рекомендацію – продовжувати деякий час ІПД вже після того, як буде досягнуте стаціонарне (граничне) значення середнього розміру зерна. Цей

висновок має бути ретельно перевірений експериментально з врахуванням того моменту, що для різних реальних матеріалів ця область може бути виражена з різною мірою прояву, а інколи може бути відсутня. Поворот кривої зміцнення з вигнутостю свідчить про те, що на цій ділянці закон зміцнення має степеневий вигляд, а саме квадратичний закон зміцнення.



Рис.2.5. - Криві зміцнення, включаючи вплив МЗ ковзання: $w_1 = 0, w_2 = 1, 2 \times 10^{-11},$ $w_3 = 5 \times 10^{-11}.$



Рис.2.6. - Криві зміцнення, включаючи вплив МЗ ковзання: $w_1 = 0, w_2 = 1,2 \times 10^{-11},$



Рис.2.7. - Криві зміцнення з нелінійним зв'язком, включаючи вплив МЗ ковзання: $w_1 = 0, w_2 = 1,2 \times 10^{-11}, w_3 = 5 \times 10^{-11}.$



Рис.2.8. - Криві зміцнення з нелінійним зв'язком, включаючи вплив МЗ ковзання: $w_1 = 0, w_2 = 1,2 \times 10^{-11}, w_3 = 5 \times 10^{-11}$ та із збільшенням параметра φ_{0g} в 50 разів.

ВИСНОВКИ

У звіті викладено основну інформацію, що стосується законів зміцнення металів.

- 1. Розкрито методи отримання наноструктурних матеріалів, а саме методи інтенсивної пластичної деформації. Розглянуто підхід НЕТ, що дозволяє однозначно визначити перебіг нерівноважних процесів у процесі обробки твердих тіл. Приведено феноменологічні основи підходу, які поєднують перший та другий закони термодинаміки, та показано математичну модель, яка дозволяє зобразити специфіку процесу фрагментації та граничної (стаціонарної) структури в процесі формування ІПД. Розглядаючи дводефектне наближення, охарактеризовано основні співвідношення в термінах внутрішньої енергії та досліджено стадійність процесу фрагментації.
- Використано додаткове відношення Тейлора, яке показує самоузгоджений обернений зв'язок між процесом формування стаціонарної структури та умовою її формування у вигляді діючих напружень.
- 3. Описано залежності густини дислокацій та меж зерен від часу, а також ці залежності з нелінійним зв'язком. Показано, що в даному модельному прикладі дислокації мають досить різкий перехід від низьких значень густини на початку процесу ІПД до вищих значень, що відповідає структурно-фазовому переходу. В той же час густина МЗ продовжує зростати, навіть після досягнення дислокаціями стаціонарного значення. Крива формою фактично повторює криву залежності густини дислокацій і повільно виходить на стаціонарне значення.
- 4. Описано залежність зовнішніх напружень від густини меж зерен, а також цю залежність з нелінійним зв'язком. Показано, що залежність переважно має вигляд монотонно спадаючої кривої, на якій практично відсутні різкі зміни або коливання. В той же час, на ній спостерігаються зміни нахилу саме в області структурно-фазового переходу, які, проте ж, можуть грати значну роль в зміні закону зміцнення.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

- 1. Leonid S. Metlov. Nonequilibrium dynamics of a two-defect system under severe load // Physical Review E 90, 022124 (2014).
- 2. Л.С. Метлов. Флуктуационные и шумовые эффекты в различных физических системах (2019).
- 3. Alexei Khomenko, Daria Troshchenko, Leonid Metlov. Effect of stochastic processes on structure formation in nanocrystalline materials under severe plastic deformation // Physical Review E 100, 022110 (2019).
- О.В.Хоменко. Інтенсивна пластична деформація: методи та математичні моделі формування наноматеріалів // Журнал фізичних досліджень т.24, №2 (2020). – 2001(20 с.).
- 5. О. В. Хоменко, М. В. Захаров, М. О. Горпинченко. Атомістичне моделювання формування та тертя матеріалів із нанорозмірними поверхнями // Журнал фізичних досліджень т. 26, №1 (2022). – 1302(8 с.).

```
Програмна реалізація для h_g та h_D
```

```
%Початкові параметри
%phi z 0 g=0.4;
phi_z_0_g = 0.4*50;
phi z 1 g = 3*(10)^{(-6)};
phi 2 g = 5.6 \times (10) \wedge (-13);
phi 3 g = 3*(10)^{(-20)};
G g = 12;
lambda_g = 2.5*(10)^{(5)};
mu g = 6*(10)^{(5)};
eps g = 3.6*(10)^{(-4)};
phi 0 D = 5.0*(10)^{(-9)};
phi 1 D = (10)^{(-24)};
G D = 2.0*(10)^{(-8)};
lambda D = 0.0;
mu D = 3.3*(10)^{(-4)};
eps D = 6*(10)^{(-23)};
phi g D = (10)^{(-16)};
psi g D = (10)^{(-23)};
y D = 60*5*(10)^{(23)};
y g = (10)^{(6)};
sq = 0;
eps ij = 0;
bet g = 0;
bet D = 0;
bet g g = 0;
bet_g D = 0;
n = 10^4; % 10^5;
t max = 5; 815
dt = t max/n;
eps ii = -0.5 \times 10^{(-3)};
eps ij 2 = 2.5 \times 10^{(-6)};
phi 0 g = vpa(phi z 0 g + G g*eps ii + ((1/2)*lambda g*eps ii^{(2)})
+ mu g*eps ij 2) - bet g*sq + bet g g*sq*eps ij, 60);
phi \overline{1} g = \overline{vpa} (phi_z_1_g + 2*eps_g*eps_ii, 60);
phi_0_D=vpa(phi_0_D + G_D*eps_ii + ((1/2)*lambda D*eps ii^(2) +
mu D*eps ij 2) - bet D*sq + bet g D*sq*eps ij, 60);
phi 1 D=vpa(phi 1 D + 2*eps_D*eps_ii, 60);
syms h g h D
f_D = inline(y_D*(phi_0_D - phi_1_D.*h_D + phi_g_D.*h_g)
, 'h_D', 'h_g'); %'E_ij_2', 'E_ii'
f g = inline(y g*(phi 0 g - phi 1 g.*h g + phi 2 g*h g.^(2) -
phi 3 g*h g.^(3) + phi g D.*h D), 'h D', 'h g'); %'E ij 2', 'E ii'
```

```
%x 0 D = 2.5*10.0^{16};
%x 0 g = 0.6*10.0^7;
x 0 D = 0.0;
x 0 g = 0.0;
m = 1;
n = 1;
tau = 0;
h D t(n,m) = x 0 D;
h g t(n,m) = x 0 g;
% first point
% Runge-Kutta
koef 1 = f D(h D t(n,m), h g t(n,m));
qar 1 = f g(h D t(n,m), h_g_t(n,m));
koef 2 = f D(h D t(n,m) + (dt*koef 1)/2, h g t(n,m) + (dt*qar 1)/2
);
qar 2 = f g(h D t(n,m) + (dt*koef 1)/2, h g t(n,m) + (dt*qar 1)/2
);
koef 3 = f D(h D t(n,m) + (dt*koef 2)/2, h g t(n,m) + (dt*qar 2)/2
);
qar 3 = f g(h D t(n,m) + (dt*koef 2)/2, h g t(n,m) + (dt*qar 2)/2
);
koef_4 = f_D(h_D_t(n,m) + dt^koef_3, h g t(n,m) + dt^kqar_3);
qar 4 = f g(h D t(n,m) + dt*koef 3, h g t(n,m) + dt*qar 3);
D 1 = h D t(n,m) + (dt/6) * (koef 1 + 2*koef 2 + 2*koef 3 + koef 4);
g 1 = h g t(n,m) + (dt/6) * (qar 1 + 2*qar 2 + 2*qar 3 + qar 4);
% end Runge-Kutta
tau = tau + dt;
while tau <= t max</pre>
        % Runge-Kutta
        koef 1 = f D(h D t(n,m), h q t(n,m));
        qar 1 = f g(h D t(n,m), h g t(n,m));
        koef 2 = f D(h D t(n,m) + (dt*koef 1)/2.0, h g t(n,m) +
(dt*qar 1)/2.0 );
        qar 2 = f q(h D t(n,m) + (dt*koef 1)/2.0, h q t(n,m) +
(dt*qar 1)/2.0 );
        koef 3 = f D(h D t(n,m) + (dt*koef 2)/2.0, h g t(n,m) +
(dt*qar 2)/2.0 );
        qar 3 = f g(h D t(n,m) + (dt*koef 2)/2.0, h g t(n,m) +
(dt*qar 2)/2.0 );
        koef_4 = f_D(h_D_t(n,m) + dt^koef_3, hg_t(n,m) + dt^kqar_3
);
```

24

```
q4 = f g(h D t(n,m) + dt^{*}koef 3, h g t(n,m) + dt^{*}qar 3);
        D 1 = h D t(n,m) + (dt/6)*(koef 1 + 2*koef 2 + 2*koef 3 +
koef 4);
        g 1 = h g t(n,m) + (dt/6)*(qar 1 + 2*qar 2 + 2*qar 3 +
q4);
        00
        %end Runge-Kutta
        m = m+1;
        h D t(n,m) = D 1;
        h g t(n,m) = g 1;
        Tau(m) = tau;
        tau = tau+dt;
end
figure(1)
plot(Tau(:),h g t(:),'black')
xlabel('time, s')
ylabel('h g')
legend('h g')
hold on
grid on
figure(2)
plot(Tau(:),h D t(:),'green')
xlabel('time, s')
ylabel('h D')
grid on
legend('h D')
%Криві зміцнення
ab = 2.75 * (10.0) ^ (-11.0);
w1 = 0;
w2 = 1.2*(10.0)^{(-11.0)};
w3 = 5.0*(10.0)^{(-11.0)};
figure(3)
eps1 = w1.*h g t(:) - ab.*sqrt(h D t(:));
plot(h g t(:),eps1, 'black')
hold on;
eps2 = w2.*h g t(:) - ab.*sqrt(h D t(:));
plot(h g t(:),eps2,'green')
eps3 = w3.*h g t(:) - ab.*sqrt(h D t(:));
plot(h g t(:),eps3, 'blue')
legend('Eps при w1', 'Eps при w2', 'Eps при w3');
grid on
xlabel('h g');
ylabel('eps');
```

26

```
Програмна реалізація для h_q та h_D з нелінійним зв'язком
```

```
%Початкові параметри
%phi z_0_g=0.4;
phi_z_0_g = 0.4*50;
phi z 1 g = 3*(10)^{(-6)};
phi 2 g = 5.6 \times (10) \wedge (-13);
phi 3 g = 3*(10)^{(-20)};
G g = 12;
lambda_g = 2.5*(10)^{(5)};
mu q = 6*(10)^{(5)};
eps g = 3.6*(10)^{(-4)};
phi 0 D = 5.0*(10)^{(-9)};
phi 1 D = (10)^{(-24)};
G D = 2.0*(10)^{(-8)};
lambda D = 0.0;
mu D = 3.3*(10)^{(-4)};
eps D = 6*(10)^{(-23)};
phi g D = (10)^{(-16)};
psi g D = (10)^{(-23)};
y D = 60*5*(10)^{(23)};
y g = (10)^{(6)};
sq = 0;
eps ij = 0;
bet_g = 0;
bet D = 0;
bet g g = 0;
bet g D = 0;
n = 10^4; % 10^5;
t max = 5; 815
dt = t max/n;
eps ii = -0.5 \times 10^{(-3)};
eps ij 2 = 2.5 \times 10^{(-6)};
phi 0 g = vpa(phi z 0 g + G g*eps ii + ((1/2)*lambda g*eps ii^{(2)})
+ mu g*eps ij 2) - bet g*sq + bet g g*sq*eps ij, 60);
phi 1 g = vpa(phi z 1 g + 2*eps g*eps ii, 60);
phi 0 D=vpa(phi 0 D + G D*eps ii + ((1/2)*lambda D*eps ii^(2) +
mu D*eps ij 2) - bet D*sq + bet g D*sq*eps ij, 60);
phi 1 D=vpa(phi 1 D + 2*eps D*eps ii, 60);
syms h g h D
f D = inline(y D*(phi 0 D - phi 1 D.*h D + phi g D.*h g -
psi g D*h g.^(2)) ,'h D','h g'); %'E ij 2','E ii'
```

```
f g = inline(y g*(phi 0 g - phi 1 g.*h g + phi 2 g*h g.^(2) -
phi 3 g*h g.^(3) + phi g D.*h D -
2*psi g D.*h g.*h D), 'h D', 'h g'); %'E ij 2', 'E ii'
\$x \ 0 \ D = 2.5*10.0^{16};
%x 0 g = 0.6*10.0^7;
x 0 D = 0.0;
x 0 g = 0.0;
m = 1;
n = 1;
tau = 0;
h D t(n,m) = x 0 D;
h g t(n,m) = x 0 g;
% first point
% Runge-Kutta
koef 1 = f D(h D t(n,m), h g t(n,m));
qar 1 = f g(h D t(n,m), h g t(n,m));
koef 2 = f D(h D t(n,m) + (dt*koef 1)/2, h g t(n,m) + (dt*qar 1)/2
);
qar 2 = f g(h D t(n,m) + (dt*koef 1)/2, h g t(n,m) + (dt*qar 1)/2
);
koef 3 = f D(h D t(n,m) + (dt*koef 2)/2, h g t(n,m) + (dt*qar 2)/2
);
qar 3 = f g(h D t(n,m) + (dt*koef 2)/2, h g t(n,m) + (dt*qar 2)/2
);
koef 4 = f D(h D t(n,m) + dt*koef_3, h_g_t(n,m) + dt*qar_3);
qar 4 = f g(h D t(n,m) + dt*koef 3, h g t(n,m) + dt*qar 3);
D 1 = h D t(n,m) + (dt/6) * (koef 1 + 2*koef 2 + 2*koef 3 + koef 4);
g 1 = h g t(n,m) + (dt/6)*(qar 1 + 2*qar 2 + 2*qar 3 + qar 4);
% end Runge-Kutta
tau = tau + dt;
while tau <= t max</pre>
        % Runge-Kutta
        koef_1 = f_D(h_D_t(n,m), h_g_t(n,m));
        qar 1 = f g(h D t(n,m), h g t(n,m));
        koef 2 = f D(h D t(n,m) + (dt*koef_1)/2.0, h_g_t(n,m) +
(dt*qar 1)/2.0 );
        qar 2 = f g(h D t(n,m) + (dt*koef 1)/2.0, h g t(n,m) +
(dt*qar 1)/2.0 );
        koef_3 = f_D(h_D_t(n,m) + (dt*koef_2)/2.0, h_g_t(n,m) +
(dt*qar 2)/2.0 );
        qar 3 = f g(h D t(n,m) + (dt*koef 2)/2.0, h g t(n,m) +
(dt*qar 2)/2.0 );
```

```
koef_4 = f_D(h_D_t(n,m) + dt*koef_3, h g t(n,m) + dt*qar 3
);
        q4 = f g(h D t(n,m) + dt*koef 3, h g t(n,m) + dt*qar 3);
        D 1 = h D t(n,m) + (dt/6)*(koef 1 + 2*koef 2 + 2*koef 3 +
koef 4);
        g 1 = h g t(n,m) + (dt/6)*(qar 1 + 2*qar 2 + 2*qar 3 +
q4);
        2
        %end Runge-Kutta
        m = m+1;
        h D t(n,m) = D 1;
        h g t(n,m) = g 1;
        Tau(m) = tau;
        tau = tau+dt;
end
figure(1)
plot(Tau(:),h g t(:),'black')
xlabel('time, s')
ylabel('h g')
legend('h g')
hold on
grid on
figure(2)
plot(Tau(:),h D t(:),'green')
xlabel('time, s')
ylabel('h D')
grid on
legend('h D')
%Криві зміцнення
ab = 2.75 * (10.0) ^ (-11.0);
w1 = 0;
w2 = 1.2*(10.0)^{(-11.0)};
w3 = 5.0*(10.0)^{(-11.0)};
figure(3)
eps1 = w1.*h q t(:) - ab.*sqrt(h D t(:));
plot(h g t(:),eps1, 'black')
hold on;
eps2 = w2.*h g t(:) - ab.*sqrt(h D t(:));
plot(h g t(:),eps2,'green')
eps3 = w3.*h g t(:) - ab.*sqrt(h D t(:));
plot(h g t(:),eps3, 'blue')
legend('Eps при w1', 'Eps при w2', 'Eps при w3');
grid on
xlabel('h g');
ylabel('eps');
```