

УДК 539.3+519.6

**ВАРИАНТ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ
ТЕОРИИ МНОГОКРАТНОГО НАЛОЖЕНИЯ
БОЛЬШИХ ДЕФОРМАЦИЙ ДЛЯ СЛУЧАЯ ТВЕРДОТЕЛЬНЫХ
ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ**

Фрейман Е.И.

Кафедра математического анализа,
Тульский государственный университет

Поступила в редакцию 20.11.2010, после переработки 15.12.2010.

Разработан алгоритм решения и его численная реализация для задачи о твердотельном фазовом переходе. Изложены основные соотношения теории наложения больших деформаций для случая твердотельного фазового перехода под действием механических напряжений. Приведены численные результаты.

An algorithm of solving a problem of solid phase transition and its numerical realization are considered in the work. The basic relations of the theory of repeated superposition of large strains in case of solid phase transition under mechanical stresses are given. Obtained numerical results are also shown in the work.

Ключевые слова: фазовый переход, градиентные эффекты, большие деформации, наложение больших деформаций, параметр порядка, связанная задача, метод конечных элементов, метод Галеркина.

Keywords: phase transition, gradient effects, large strains, superposition of large strains, order parameter, coupled problem, finite element method, Galerkin method.

Введение

Распространенным подходом к описанию фазовых переходов является феноменологическая теория Ландау-Гинзбурга [1]. Основным понятием в этой теории является понятие параметра порядка, который характеризует атомную конфигурацию в материале в процессе фазового перехода. Данная работа выполнена в рамках этого подхода, рассмотрена модель твердотельных фазовых переходов с учетом возникновения нескольких фаз для случая конечных деформаций [2, 5, 6, 12]. Модель рассмотрена в рамках механики деформируемого твердого тела. Получена математическая постановка задачи на основе теории наложения больших деформаций [3, 4, 9, 10], разработан и апробирован алгоритм её численного решения. Проведены численные эксперименты по фазовым переходам для наноразмерного случая.

1. Постановка задачи

Будем считать, что в теле при переходе его из начального в $(p-1)$ -е состояние не происходило фазовых превращений ($\eta_k = 0$). В этом состоянии возник зародыш новой фазы (область, в которой параметр порядка $\eta_k \neq 0$). Вследствие этого в теле начинается процесс фазовых превращений, и тело перешло в p -е (текущее, зависящее от времени) состояние.

Математическая постановка задачи [1, 2, 5] включает уравнение равновесия среды (в предположении, что фазовый переход можно рассматривать как квазистатический процесс)

$$\overset{p-1}{\nabla} \cdot \left[(1 + \Delta_{0,p-1})^{-1} \overset{p-1}{\Sigma}_{0,p} \cdot \Psi_{p-1,p} \right] = 0.$$

Здесь $\overset{p-1}{\Sigma}_{0,p} = \Psi_{0,p-1}^* \cdot \overset{0}{\Sigma}_{0,p} \cdot \Psi_{0,p-1}$ — тензор обобщенных напряжений для p -го состояния, записанный в координатах $(p-1)$ -го состояния, $\overset{0}{E}_e = \frac{1}{2} (\Psi_e \cdot \Psi_e^* - I)$ — тензор упругой деформации, $\Psi_e = \Psi_t^{-1} \cdot \Psi_{0,p}$ — аффино́р упругой деформации, $\Psi_{0,p} = \Psi_{0,p-1} \cdot \Psi_{p-1,p}$ — аффино́р деформаций при переходе из начального в p -е состояние, $\Psi_{p-1,p} = I + \overset{p-1}{\nabla} u_p$ — аффино́р деформаций при переходе из $(p-1)$ -го в p -е состояние, Ψ_t — аффино́р собственной деформации.

Определяющее соотношение, соответствующее потенциалу Мурнагана:

$$\begin{aligned} \overset{0}{\Sigma}_{0,p} = & \lambda(\eta) \left(\overset{0}{E}_e : I \right) I + 2\mu(\eta) \overset{0}{E}_e + 3C_3(\eta) \left(\overset{0}{E}_e : I \right)^2 I + \\ & + C_4(\eta) \left(\overset{0}{E}_e^2 : I \right) I + 2C_4(\eta) \left(\overset{0}{E}_e : I \right) \overset{0}{E}_e + 3C_5(\eta) \left(\overset{0}{E}_e \right)^2 \end{aligned}$$

Эволюционное уравнение для k -го параметра порядка ($k = 1, \dots, n$):

$$\frac{\partial \eta_k}{\partial t} = 2\Lambda\beta \overset{p-1}{\nabla} \cdot \left(\overset{p-1}{\nabla} \eta_k \right) + \Lambda X_k,$$

здесь Λ — кинетический коэффициент, β — коэффициент, характеризующий ширину размытой границы между фазами, X_k — движущая сила фазового перехода (это скалярная величина, которая зависит от напряженно-деформированного состояния).

Граничные условия: заданные напряжения на внешней границе

$$\sigma_{0,n} = \sigma_\infty,$$

нулевые нормальные напряжения на внутренних границах

$$\overset{n-1}{N} \cdot \overset{n-1}{\Sigma}_{0,n} = 0,$$

нулевая производная параметра порядка по направлению нормали к контуру как на внешней, так и на внутренних границах:

$$\overset{n-1}{N} \cdot \left(\overset{n-1}{\nabla} \eta_k \right) = 0.$$

Начальные условия: в момент t_0 начала фазового перехода $\eta_k = \eta_k^*$ в некоторой заданной области; η_k^* — некоторое заданное значение ($0 < \eta_k^* < 1$). Для остальных характеристик напряженно-деформированного состояния начальные значения равны значениям соответствующих величин в $(n - 1)$ -м состоянии. Дополнительные перемещения $u_n(t_0) = 0$.

2. Описание алгоритма

При программной реализации фазовый переход рассматривается как процесс, происходящий во времени и пространстве, описываемый дифференциальными уравнениями равновесия механики деформируемого твердого тела и уравнениями эволюции [5]. Первый шаг решения этой связанной задачи — замена производных по времени их конечно-разностным приближением. Таким образом, задача разбивается на шаги по времени. На каждом шаге по времени необходимо решить связанную задачу, состоящую из уравнений равновесия и эволюции.

Рассмотрим решение связанной задачи на шаге по времени. Для того чтобы одновременно удовлетворить уравнениям и равновесия и эволюции используется итерационный процесс, который детально рассматривается ниже. В расчетах мы использовали итерационный процесс, состоящий из двух итераций.

На рис. 1 представлен укрупненный алгоритм решения задачи.

3. Подход к численному решению связанной задачи

Рассмотрим эволюционное уравнение для параметра порядка:

$$\frac{\partial \eta_k}{\partial t} = 2\Lambda\beta \nabla^{p-1} \cdot \left(\nabla^{p-1} \eta_k \right) + \Lambda X_k, \quad k = 1, \dots, n. \quad (1)$$

При численном решении производная по t заменяется конечно-разностным выражением $\frac{\partial \eta_k}{\partial t}(t_j) = \frac{\eta_k(t_j) - \eta_k(t_{j-1})}{\tau}$. Далее можно использовать либо метод сеток, либо МКЭ [7, 8]. В методе сеток возникают сложности с граничными условиями, если область не прямоугольная, поэтому мы будем использовать МКЭ. Для неявной схемы из (10) получаются уравнения

$$\frac{\eta_k(t_j) - \eta_k(t_{j-1})}{\tau} = 2\Lambda\beta \nabla^{p-1} \cdot \left(\nabla^{p-1} \eta_k(t_j) \right) + \Lambda X_k(t_j), \quad k = 1..n. \quad (2)$$

Эти уравнения для j -го момента времени можно решить МКЭ, если $\eta_k(t_{j-1})$ известно, далее подставить найденные $\eta_k(t_j)$ в уравнение равновесия и из него найти перемещения в момент времени t_j , затем перейти к следующему шагу по времени.

Трудность заключается в том, что в уравнениях (2) $X_k(t_j)$ неизвестно, т.к. зависит от перемещений в момент времени t_j . Поэтому предлагается на каждом шаге по времени использовать итерационный процесс. Сначала вместо $X_k(t_j)$ берется $X_k(t_{j-1})$, т.е. решаются уравнения



Рис. 1: Укрупненный алгоритм решения задачи

$$\frac{\eta_k(t_j) - \eta_k(t_{j-1})}{\tau} = 2\Lambda\beta \nabla^{p-1} \cdot \left(\nabla^{p-1} \eta_k(t_j) \right) + \Lambda X_k(t_{j-1}), \quad k = 1, \dots, n. \quad (3)$$

Далее из уравнений равновесия находятся перемещения в момент времени t_j и по ним определяются $X_k(t_j)$, а затем пересчитываются уравнения (2) с найденным $X_k(t_j)$. Можно сделать ещё одну итерацию, снова пересчитав уравнения равновесия, а затем эволюции. При решении задач использовался процесс, состоящий из двух итераций. Ниже представлены его основные моменты:

1. Сохранение распределения параметров порядка.
2. Решение уравнений равновесия

$$\nabla^{p-1} \cdot \left[(1 + \Delta_{0,p-1})^{-1} \Sigma_{0,p}^{p-1} \cdot \Psi_{p-1,p} \right] = 0$$

(при заданном распределении параметра порядка). Вычисление перемещений.

3. Вычисление $X_k(t_{j-1})$.
4. Решение эволюционных уравнений

$$\frac{\eta_k(t_j) - \eta_k(t_{j-1})}{\tau} = 2\Lambda\beta \nabla^{p-1} \cdot \left(\nabla^{p-1} \eta_k(t_j) \right) + \Lambda X_k(t_{j-1}),$$

$k = 1, \dots, n$. Предварительное вычисление параметров порядка $\eta_k(t_j)$.

5. Пересчет уравнений равновесия (при найденном предварительном распределении параметров порядка). Вычисление перемещений.
6. Вычисление $X_k(t_j)$, $k = 1, \dots, n$.
7. Восстановление параметров порядка (сохраненных в пункте 1).
8. Окончательное решение эволюционных уравнений

$$\frac{\eta_k(t_j) - \eta_k(t_{j-1})}{\tau} = 2\Lambda\beta \nabla^{p-1} \cdot \left(\nabla^{p-1} \eta_k(t_j) \right) + \Lambda X_k(t_j).$$

4. Численное решение эволюционных уравнений на шаге по времени

На каждом шаге по времени решаются эволюционные уравнение и уравнения равновесия с помощью МКЭ [7, 8] с использованием метода Галеркина. Рассмотрим решение эволюционного уравнения с одним параметром порядка. Его потом несложно будет обобщить на случай нескольких параметров порядка.

Рассмотрим эволюционное уравнение на шаге по времени:

$$\frac{\eta_1(t_j) - \eta_1(t_{j-1})}{\tau} = 2\Lambda\beta \cdot \nabla^{n-1} \cdot \left(\nabla^{n-1} \eta_1(t_j) \right) + \Lambda X_1(t_{j-1}).$$

Для удобства записи обозначим $\eta_1(t_j) = H$, $\eta_1(t_{j-1}) = \eta$, $X_1(t_{j-1}) = X(\eta)$, $\nabla^{n-1} = \nabla$. Тогда это уравнение примет вид

$$\frac{H - \eta}{\tau} = 2\Lambda\beta \cdot \nabla \cdot (\nabla H) + \Lambda X,$$

или

$$\frac{H}{\tau} - 2\Lambda\beta \cdot \nabla \cdot (\nabla H) = \Lambda X(\eta) + \frac{\eta}{\tau}.$$

Правая часть этого уравнения — сложная, нелинейная, но известная функция от η . Обозначим её через f :

$$f = \Lambda X(\eta) + \frac{\eta}{\tau}.$$

В итоге получим запись эволюционного уравнения в виде

$$\frac{H}{\tau} - 2\Lambda\beta \cdot \nabla \cdot (\nabla H) = f.$$

Это дифференциальное уравнение, где неизвестной является скалярная функция $H = H(x, y)$. Для решения с помощью МКЭ применим метод Галеркина. Обозначим через N_i функции формы, тогда уравнения метода Галеркина можно записать в виде

$$\iint_D N_i \left[\frac{H}{\tau} - 2\Lambda\beta \cdot \nabla \cdot (\nabla H) - f \right] dS = 0,$$

или

$$\frac{1}{\tau} \iint_D N_i H dS - 2\Lambda\beta \iint_D N_i \nabla \cdot (\nabla H) dS - \iint_D N_i f dS = 0 \quad (4)$$

Первое слагаемое в (4) преобразуем следующим образом:

$$\frac{1}{\tau} \iint_D N_i H dS = \frac{1}{\tau} \iint_D \begin{pmatrix} N_1 \\ N_2 \\ N_3 \end{pmatrix} (H_1 N_1 + H_2 N_2 + H_3 N_3) dS,$$

где H_1, H_2, H_3 — значения искомого параметра порядка в узлах треугольного элемента. Это равенство можно записать в виде

$$\frac{1}{\tau} \iint_D N_i H dS = \frac{1}{\tau} \iint_D \begin{pmatrix} H_1 N_1^2 + H_2 N_1 N_2 + H_3 N_1 N_3 \\ H_1 N_2 N_1 + H_2 N_2^2 + H_3 N_2 N_3 \\ H_1 N_3 N_1 + H_2 N_3 N_2 + H_3 N_3^2 \end{pmatrix} dS$$

Поскольку функции формы являются L -координатами, $\iint_D N_i^2 dS = \frac{A}{6}$, $\iint_D N_i N_j dS = \frac{A}{12}$. С учетом этого получим:

$$\frac{1}{\tau} \iint_D N_i H dS = \frac{A}{12\tau} \begin{pmatrix} 2H_1 + H_2 + H_3 \\ H_1 + 2H_2 + H_3 \\ H_1 + H_2 + 2H_3 \end{pmatrix}.$$

Второе слагаемое в (4) преобразуем с помощью формулы Грина:

$$-2\Lambda\beta \iint_D N_i \nabla \cdot (\nabla H) dS = 2\Lambda\beta \iint_D \nabla N_i \cdot (\nabla H) dS - 2\Lambda\beta \int_{\Gamma} \bar{n} N_i (\nabla H) dS.$$

В граничных условиях указано, что $\bar{n}(\nabla H)|_{\Gamma} = 0$, следовательно, интеграл по границе в предыдущем выражении равен нулю. В итоге получим:

$$-2\Lambda\beta \iint_D N_i \nabla \cdot (\nabla H) dS = 2\Lambda\beta \iint_D \nabla N_i \cdot (\nabla H) dS$$

В МКЭ предлагается использовать треугольные симплекс-элементы [7], поэтому градиенты функций форм и градиенты параметров порядка постоянны на элементе. Если площадь треугольника A , то в итоге получим:

$$-2\Lambda\beta \iint_D N_i \nabla \cdot (\nabla H) dS = 2\Lambda\beta \nabla N_i \cdot \nabla H \cdot A$$

В результате этих преобразований уравнение (4) преобразуется к виду

$$2\Lambda\beta \begin{pmatrix} \nabla N_1 \\ \nabla N_2 \\ \nabla N_3 \end{pmatrix} \cdot \nabla H \cdot A + \frac{A}{12\tau} \begin{pmatrix} 2H_1 + H_2 + H_3 \\ H_1 + 2H_2 + H_3 \\ H_1 + H_2 + 2H_3 \end{pmatrix} = \iint_D \begin{pmatrix} N_1 \\ N_2 \\ N_3 \end{pmatrix} f dS,$$

или

$$\left[2\Lambda\beta \begin{pmatrix} \nabla N_1 \\ \nabla N_2 \\ \nabla N_3 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} H_1 & H_2 & H_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \nabla N_1 \\ \nabla N_2 \\ \nabla N_3 \end{pmatrix} \right] + \frac{1}{12\tau} \begin{pmatrix} 2H_1 + H_2 + H_3 \\ H_1 + 2H_2 + H_3 \\ H_1 + H_2 + 2H_3 \end{pmatrix} A = \iint_D \begin{pmatrix} N_1 \\ N_2 \\ N_3 \end{pmatrix} f dS. \quad (5)$$

Из левой части этого равенства можно выделить вектор неизвестных и получить матрицу жесткости

$$K = \frac{A}{12\tau} \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{pmatrix} + 2\Lambda\beta A \begin{pmatrix} N_{1,x}^2 + N_{1,y}^2 & N_{1,y}N_{2,y} + N_{1,x}N_{2,x} & N_{1,y}N_{3,y} + N_{1,x}N_{3,x} \\ \text{симметрично} & N_{2,x}^2 + N_{2,y}^2 & N_{3,y}N_{2,y} + N_{3,x}N_{2,x} \\ \text{симметрично} & \text{симметрично} & N_{3,x}^2 + N_{3,y}^2 \end{pmatrix},$$

где $N_{1,x}$ — производная от первой функции формы по x , $N_{1,y}$ — по y , и т.д.

В итоге получается линейная система уравнений:

$$K \cdot \vec{H} = \iint_D \begin{pmatrix} N_1 f(\eta) \\ N_2 f(\eta) \\ N_3 f(\eta) \end{pmatrix} dS.$$

Интегралы в правой части этой системы можно взять численно, например, по шести точкам на треугольнике (вершины и середины сторон).

Составляя ансамбль конечных элементов, получаем линейную систему уравнений, из решения которой находим распределение параметров порядка на шаге по времени. Если параметров порядка больше одного, локальная матрица жесткости получается объединением одинаковых (уже полученных) матриц жесткости соответственно новым степеням свободы. f в таком случае будет уже вектором, количество элементов которого равно количеству параметров порядка.

5. Численное решение уравнения равновесия на шаге по времени

Так как задача решается для конечных деформаций и нелинейного материала (определяющее соотношение Мурнагана), необходим учет физической и геометрической нелинейностей. Для этого используется МКЭ [7, 8] совместно с методом Галеркина. Нелинейная система уравнений решается с помощью метода Ньютона. В процессе численного решения необходимо следить за сходимостью процесса.

Рассмотрим уравнение равновесия (3):

$$\nabla^{p-1} \cdot \left[(1 + \Delta_{0,p-1})^{-1} \Sigma_{0,p}^{p-1} \cdot \Psi_{p-1,p} \right] = 0$$

К уравнению равновесия применяется принцип Б. Г. Галёркина:

$$\iint_D N_i \left\{ \nabla^{p-1} \left[(1 + \Delta_{0,p-1})^{-1} \Sigma_{0,p}^{p-1} \Psi_{p-1,p} \right] \right\} = 0,$$

где N_i — функции, которыми мы будем приближать искомую функцию (перемещение точек матрицы). Далее выражение преобразуется с помощью формулы Грина:

$$\begin{aligned} \iint_D (\nabla N_i) \left[(1 + \Delta_{0,p-1})^{-1} \Sigma_{0,p}^{p-1} \Psi_{p-1,p} \right] dS &= \\ &= \int_{\Gamma} n_p^{p-1} \cdot N_i \left[(1 + \Delta_{0,p-1})^{-1} \Sigma_{0,p}^{p-1} \Psi_{p-1,p} \right] d\Gamma. \end{aligned}$$

В правую часть подставляются граничные условия:

$$\begin{aligned} \iint_D (\nabla N_i) \left[(1 + \Delta_{0,p-1})^{-1} \Sigma_{0,p}^{p-1} \Psi_{p-1,p} \right] dS &= \\ &= \int_{\Gamma} N_i \left[-p (1 + \Delta_{0,p-1})^{-1} n_p^{p-1} \Psi_{p-1,p} \right] d\Gamma \end{aligned}$$

Интеграл по всей области представляется как сумма интегралов по элементам разбиения:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N \iint_{D_i} \begin{pmatrix} \nabla N_1 \\ \nabla N_2 \\ \nabla N_3 \end{pmatrix} \left[(1 + \Delta_{0,p-1})^{-1} \Sigma_{0,p}^{p-1} \Psi_{p-1,p} \right] dS = \\ = \sum_{i=1}^N \int_{\Gamma_i} \begin{pmatrix} N_1 \\ N_2 \\ N_3 \end{pmatrix} \left[-p (1 + \Delta_{0,p-1})^{-1} n_p^{p-1} \Psi_{p-1,p} \right] d\Gamma. \end{aligned}$$

Рассмотрим использование в МКЭ треугольных симплекс-элементов [7]. При этом искомая функция (перемещение) приближается на элементе линейно. Отсюда следует что, градиенты перемещений постоянны на элементе, постоянен аффиноор деформации, тензор деформации и тензор напряжений.

С учётом этого перепишем последнее равенство для одного элемента следующим образом:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \nabla N_1 \\ \nabla N_2 \\ \nabla N_3 \end{pmatrix} \left[(1 + \Delta_{0,p-1})^{-1} \Sigma_{0,p}^{p-1} \Psi_{p-1,p} \right] \iint_{D_i} dS = \\ = \left[(1 + \Delta_{0,p-1})^{-1} \right] \int_{\Gamma_i} \begin{pmatrix} N_1 \\ N_2 \\ N_3 \end{pmatrix} \left(-p n_p^{p-1} \Psi_{p-1,p} \right) d\Gamma \end{aligned}$$

Интеграл в правой части можно расписать как сумму интегралов по сторонам треугольника:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \nabla N_1 \\ \nabla N_2 \\ \nabla N_3 \end{pmatrix} \left[(1 + \Delta_{0,p-1})^{-1} \Sigma_{0,p}^{p-1} \Psi_{p-1,p} \right] A = \\ = \left[(1 + \Delta_{0,p-1})^{-1} \right] \cdot \left[\int_{L^1} \begin{pmatrix} N_1 \\ N_2 \\ N_3 \end{pmatrix} \left(-p^1 n_p^{p-1} \Psi_{p-1,p} \right) dl + \right. \\ \left. + \int_{L^2} \begin{pmatrix} N_1 \\ N_2 \\ N_3 \end{pmatrix} \left(-p^2 n_p^{p-1} \Psi_{p-1,p} \right) dl + \right. \\ \left. + \int_{L^3} \begin{pmatrix} N_1 \\ N_2 \\ N_3 \end{pmatrix} \left(-p^3 n_p^{p-1} \Psi_{p-1,p} \right) dl \right]. \end{aligned}$$

Примем, что нагрузка не меняется по длине стороны. При этом интеграл по сторонам треугольника от функций форм будет записан в виде

$$\begin{aligned}
\begin{pmatrix} \nabla N_1 \\ \nabla N_2 \\ \nabla N_3 \end{pmatrix} \left[(1 + \Delta_{0,p-1})^{-1} \Sigma_{0,p} \Psi_{p-1,p} \right] A = \\
= \left[(1 + \Delta_{0,p-1})^{-1} \right] \cdot \left[\begin{pmatrix} 0 \\ l^1/2 \\ l^1/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -p^1 n_p^{-1} \Psi_{p-1,p} \end{pmatrix} + \right. \\
\left. + \begin{pmatrix} l^2/2 \\ 0 \\ l^2/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -p^2 n_p^{-1} \Psi_{p-1,p} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} l^3/2 \\ l^3/2 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -p^3 n_p^{-1} \Psi_{p-1,p} \end{pmatrix} \right]. \quad (6)
\end{aligned}$$

Для рассматриваемого типа конечного элемента матричное уравнение (6) представляет собой 6 нелинейных уравнений, которые можно получить, выразив напряжения и деформации в элементе через его узловые перемещения.

6. Результаты численного решения (переход аустенита в мартенситные фазы при растяжении)

Для проведения тестовых расчетов был взят образец из сплава $Ni_{65}Al_{35}$ [2, 5, 6] размером 33.3 нм с круговым отверстием радиуса 6.67 нм, расположенным в центре. Вокруг отверстия располагалось включение в форме кругового кольца с тем же центром. Его внутренняя граница совпадала с границей отверстия, а внешний радиус был равен 8.33 нм. Включение представляло собой «смешанный» зародыш фаз M_1 и M_2 ($\eta_1 = 0.1$, $\eta_2 = 0.1$). Нагрузка – всестороннее растяжение ($p_x = p_y = 5$). Расчеты выполнялись для случая плоской деформации с шагом по времени 0.00002 нс. Площадь элементов – не более 0.09 нм².

Расчет показал, что слева и справа от отверстия **возникли области второй фазы мартенсита**, а сверху и снизу от отверстия – **области первой фазы мартенсита** (мартенситным фазам соответствуют единичные значения параметров порядка). Эти области росли со временем и достигли границ образца, после чего продолжили расширяться. Они имели примерно одинаковую форму. Процесс формирования этих областей завершился примерно к моменту времени $t = 0.00186$ нс, когда они вместе заполнили практически весь образец. Границы между ними прошли по диагоналям квадрата. При этом на промежуточных стадиях процесса вблизи диагоналей квадрата материал оставался в исходной фазе (аустенит), а на завершающей стадии область исходной фазы практически исчезла.

Распределение параметра порядка в каждой из сформировавшихся областей неоднородно. Вблизи отверстия в каждой такой области имеется зона, где значение параметра порядка близко к 1, а в остальной части каждой области значение параметра порядка близко к 0.5.

В момент времени $t = 0.00140$ нс максимальное приращение параметра порядка за шаг по времени составило 0.005, а в момент времени $t = 0.00186$ нс – 0.003. За период между этими двумя моментами времени максимальное приращение параметра порядка за шаг по времени не превышало 0.005. Это, видимо, позволяет сделать вывод о стабилизации процесса.

Результаты расчетов представлены на рис. 2.

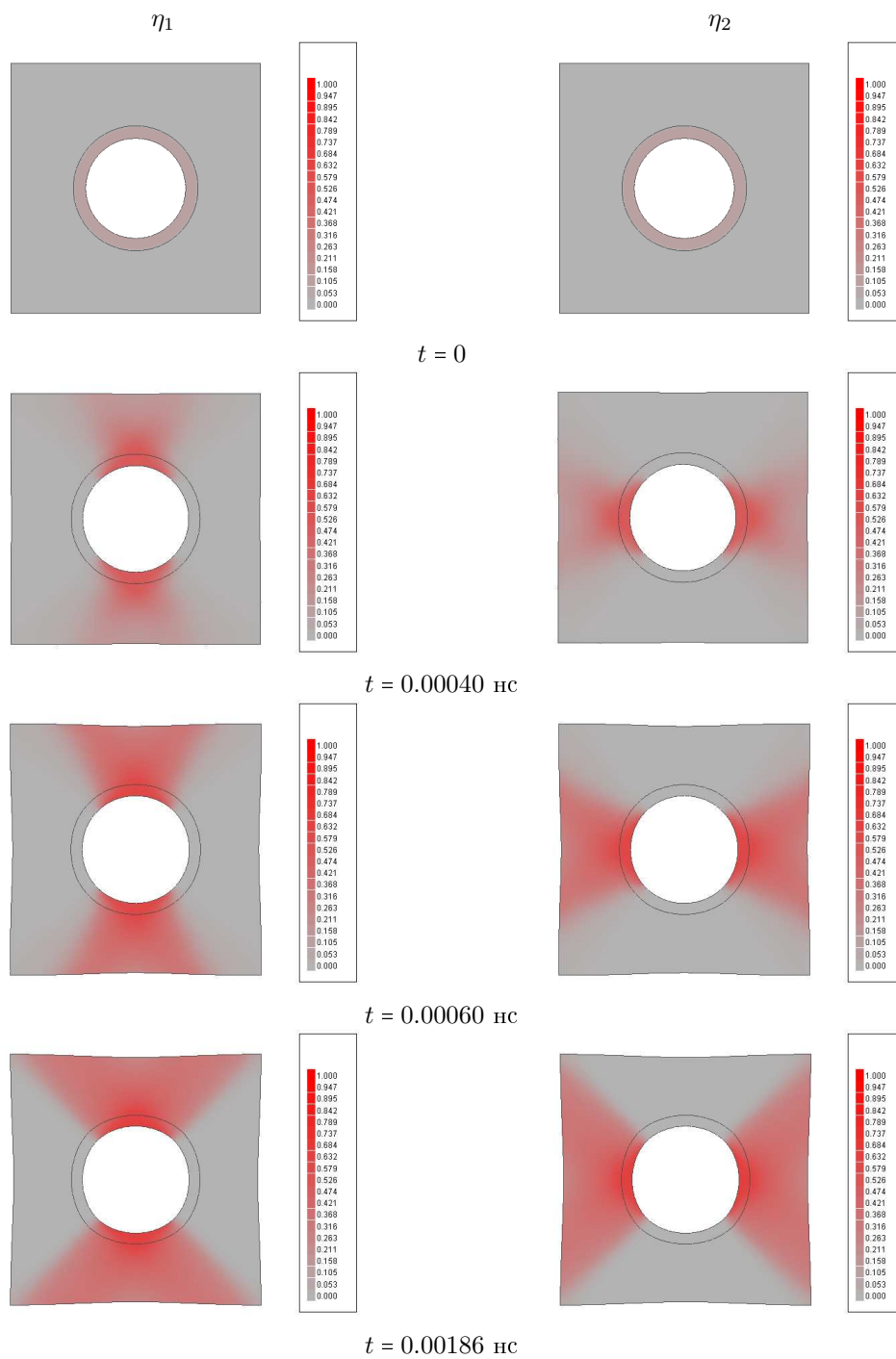


Рис. 2: Переход аустенита в мартенситные фазы при растяжении

Выводы

Разработан и апробирован алгоритм решения плоских задач о фазовых переходах на базе МКЭ [11]. Проведено численное моделирование. Его результаты подтверждают возможность образования устойчивых областей мартенситных фаз для многофазного материала.

Автор благодарит фонд «Династия» за оказанную поддержку.

Список литературы

- [1] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. 5. Статистическая физика. Часть 1. М.: Физматлит, 2002. – 616 с.
- [2] Levitas V.I., Preston D.L. Thermomechanical lattice instability and phase field theory of martensitic phase transformations, twinning and dislocations at large strains. *Physics Letters A*, 2005, Vol. 343, P. 32-39.
- [3] Зингерман К.М., Левин В.А. Перераспределение конечных упругих деформаций после образования включений. Приближенное аналитическое решение. // *Прикладная математика и механика*. 2009. Т. 73, вып. 6. С. 983-1001.
- [4] Левин В.А. К построению модели развития дефекта при конечных деформациях. Нелокальные критерии. // *Прикладная математика и механика*, 2008, т. 72, вып. 3.
- [5] Levitas V.I., Levin V.A., Zingerman K.M., Freiman E.I. Displacive Phase Transitions at Large Strains: Phase-Field Theory and Simulations // *Physical Review Letters* 103, 025702 (2009). Повторно опубликована по решению редколлегии on-line журналом *Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology*(American Institute of Physics, American Physical Society)
- [6] Левин В.А., Зингерман К.М., Фрейман Е.И. Вариант модели фазового перехода в теле с конечными деформациями. Численный эксперимент. // *Вестник Тверского государственного университета*. Серия: Прикладная математика. Вып. 13. 2009. С. 23-30.
- [7] Zienkiewicz O.C., Taylor R.L. *The finite element method*. Vol. 1. The basis. 2000. 707 p.
- [8] Zienkiewicz O.C., Taylor R.L. *The finite element method*. Vol. 2. Solid mechanics. 2000. 479 p.
- [9] Levin V.A., Vershinin A.V. Non-stationary plane problem of the successive origination of stress concentrators in a loaded body. Finite deformations and their superposition. // *Communications in Numerical Methods in Engineering*. 2008. V. 24. Issue 12. P. 2229-2239.
- [10] Levin V.A., Zingerman K.M. A class of methods and algorithms for the analysis of successive origination of holes in a pre-stressed viscoelastic body. Finite strains. // *Communications in Numerical Methods in Engineering*, v.24, 2008.

- [11] Levin V.A., Zingerman K.M., Vershinin A.V., Freiman E.I., Kukushkin A.V., Trachenko A.V. Development and use of the CAE-system «FIDESYS» for nonlinear analysis of solids with microstructure that changed during loading. //ECCM 2010 IV European Conference on Computational Mechanics, Paris, France, May 16-21, 2010. (https://www.eccm-2010.org/abstract_pdf/abstract_1650.pdf).
- [12] Левин В.А., Левитас В.И., Лохин В.В., Зингерман К.М., Саяхова Л.Ф., Фрейдман Е.И. Твердотельные фазовые переходы, вызванные действием механических напряжений в материале с наноразмерными неоднородностями: модель и вычислительный эксперимент // Доклады РАН. 2010. Т. 434, № 4. С. 481–485.