Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки. 2018. Т. 22, № 3. С. 407–429
ISSN: 2310-7081 (online), 1991-8615 (print) http://doi.org/10.14498/vsgtu1626

Механика деформируемого твёрдого тела

УДК 539.4.015.1:539.3

Моделирование фазовых превращений и сверхупругого упрочнения нестабильных материалов

Е. А. Ильина, Л. А. Сараев

Самарский национальный исследовательский университет
имени академика С.П. Королева,
Россия, 443086, Самара, Московское ш., 34.

Аннотация

Представлены модели сверхупругого упрочнения материалов с нестабильной фазовой структурой при постоянной температуре. Сформулировано кинетическое уравнение процесса образования и роста сферических зародышей новой фазы в зависимости от уровня развития неупругих структурных деформаций, согласно которому новая фаза сначала представляет собой отдельные включения из зародышей, развиваясь, она образует структуры матричной смеси в виде взаимопроникающих каркасов, и, наконец, новая фаза превращается в матрицу с отдельными включениями из материала остатков старой фазы. Исследовано влияние структурных деформаций на особенности фазовых превращений и нелинейного упрочнения неоднородных нестабильных материалов с различной степенью связности составляющих фаз. Рассмотрены различные варианты образуемой в условиях фазового перехода микроструктуры материала в виде отдельных включений и в виде взаимопроникающих компонентов. Установлены новые макроскопические определяющие соотношения для нестабильных микронеоднородных материалов и вычислены их эффективные модули упругости. Получены макроскопические условия прямого и обратного фазовых переходов, вычислены их эффективные пределы и коэффициенты упрочнения. Показано, что значения макроскопических модулей упругости полученных моделей лежат внутри вилки нижней и верхней границы Хашина–Штрикмана. Численный

Научная статья

Образец для цитирования
Ильина Е. А., Сараев Л. А. Моделирование фазовых превращений и сверхупругого упрочнения нестабильных материалов // *Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки*, 2018. Т. 22, № 3. С. 407–429. doi: 10.14498/vsgtu1626.

Сведения об авторах
Елена Алексеевна Ильина http://orcid.org/0000-0002-2590-6138
кандидат физико-математических наук, доцент; доцент; каф. математики и бизнес-информатики; e-mail: elenaalex.ilyina@yandex.ru

Леонид Александрович Сараев http://orcid.org/0000-0003-3625-5921
доктор физико-математических наук, профессор; заведующий кафедрой; каф. математики и бизнес-информатики; e-mail: saraev_leo@mail.ru

анализ разработанных моделей показал хорошее соответствие известным экспериментальным данным.

Ключевые слова: фазы, макроскопические свойства, модули упругости, статистическая однородность, структура, структурные деформации, фазовый переход, эргодичность, эффективные соотношения.

Получение: 13 мая 2018 г. / Исправление: 21 августа 2018 г. / Принятие: 3 сентября 2018 г. / Публикация онлайн: 9 сентября 2018 г.

Введение. Развитие методов расчета деформирования элементов конструкций, изготовленных из формозапоминающих материалов, представляет собой актуальное направление современной механики и материаловедения. Необычные уникальные механические свойства таких материалов широко применяются в машиностроении, в теплоэнергетическом комплексе, медицине и других отраслях экономики. Подобные материалы служат основой для создания самостоятельно трансформирующихся элементов автоматически разворачивающихся космических антенн. Из них изготавливаются специальные муфты для аварийного соединения трубчатых деталей подводных конструкций на больших глубинах. Специальные стопоры, изготовленные из формозапоминающих сплавов, позволяют осуществлять крепления элементов конструкций только с внутренней стороны в тех случаях, когда внешняя сторона изделия недоступна. Такие материалы используют для создания устройств силовой блокировки, для специальных прессов, домкратов, имплантов, стентов и т.д.

Деформирование нестабильных материалов и формозапоминающих сплавов сопровождается образованием в них внутренней развивающейся сложной структуры из-за фазовых переходов первого рода. Для адекватной оценки механических свойств таких материалов, их сверхупругого поведения и эффектов памяти формы требуется разработка структурных математических моделей превращений фазовых структур. С помощью феноменологического подхода к решению такого рода задач разработан ряд моделей, в которых механическое поведение материалов с памятью формы описывается с помощью реологических соотношений. Здесь непрерывное изменение структуры среды, находящейся в условиях фазовых превращений, задается набором параметров определяющих соотношений, который приходится определять экспериментальным путем [1–5].

В более сложном структурно-феноменологическом подходе задаются физико-механические константы и геометрические параметры для составляющих фаз, а макроскопические определяющие уравнения для нестабильных и формозапоминающих сред устанавливаются методами механики композитов. Разработкам различных вариантов моделей нестабильных материалов сплавов с памятью формы посвящен ряд работ отечественных [6–9] и зарубежных авторов [10–17].

В настоящей работе предполагается, что под воздействием внешних нагрузок в объеме старой фазы образуется новая фаза, внутри которой из-за трансформации кристаллической и доменной структуры материала возникают и развиваются необратимые структурные деформации. Уровень этих деформаций всегда ограничен предельными сдвигами двойниковых доменов.

Целью работы является разработка новых структурно-феноменологических моделей сверхупругого упрочнения материалов с нестабильной фазовой структурой. Особенность этих моделей и их научная новизна заключаются в том, что рост новой фазы описывается не только ростом ее относительного объема, но и изменением внутренней структуры этого объема. В начале процесса новая фаза представляет собой отдельные включения из зародышей, развиваясь далее, она образует структуры матричной смеси в виде взаимопроникающих каркасов, и, наконец, новая фаза превращается в матрицу с отдельными включениями из материала остатков старой фазы.

1. Постановка задачи. Рассмотрим однородный упругий материал, в котором под воздействием внешних напряжений образуются зародыши новой фазы сферической формы и происходит фазовый переход первого рода. Объем возникающей и развивающейся новой фазы V_q и объем старой фазы V_p составляют полный объем материала V, ограниченный поверхностью S.

Вытеснение под воздействием внешних нагрузок новой фазой старой фазы, вызванное перестройкой кристаллической и доменной структуры материала:

$$\begin{gathered} V_q \to V, \\ V_p \to V - V_q \to 0, \end{gathered}$$

сопровождается возникновением и развитием необратимых структурных деформаций $\omega_{ij}(\mathbf{r})$, которые ограничены предельными сдвигами двойниковых доменов:

$$0 \leqslant \omega_{ij} \leqslant \omega_{ij}^{\max}.$$

Здесь $\omega_{ij}^{\max}$ — максимальный уровень структурных деформаций, которые удовлетворяют условию несжимаемости $\omega_{ss}(\mathbf{r}) = 0$.

Закон Гука для компонентов рассматриваемой среды имеет вид

$$\begin{aligned} \sigma_{ij} &= 2\mu_p \varepsilon_{ij} + \delta_{ij}\lambda_p \varepsilon_{ss}, && \mathbf{r} \in V_p, \\ \sigma_{ij} &= 2\mu_q(\varepsilon_{ij} - \omega_{ij}) + \delta_{ij}\lambda_q \varepsilon_{ss}, && \mathbf{r} \in V_q. \end{aligned} \tag{1}$$

Здесь σ_{ij}, ε_{ij} — тензоры напряжений и полных деформаций; μ_s, λ_s — параметры Ламе компонентов.

Уровни напряжений, соответствующие началу прямого и обратного фазовых переходов, задаются поверхностями линейного кинематического упрочнения в шестимерном пространстве напряжений:

$$\begin{aligned} \big(s_{ij} - 2n_f\omega_{ij}\big)\big(s_{ij} - 2n_f\omega_{ij}\big) &= s_f^2, \quad V_q \to V, \\ \big(s_{ij} - 2n_b\omega_{ij}\big)\big(s_{ij} - 2n_b\omega_{ij}\big) &= s_b^2, \quad V_p \to V. \end{aligned} \tag{2}$$

Здесь $s_{ij} = \sigma_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\sigma_{ss}$ — девиаторные компоненты тензора напряжений; s_f, s_b — пределы прямого и обратного фазовых переходов; n_f, n_b — коэффициенты линейного упрочнения двойниковых доменов соответственно. Величины $s_{f,b}$ и $n_{f,b}$ зависят от температуры, а их численные значения задают тип поведения нестабильной среды. Это может быть либо сверхупругое поведение образцов материала, либо деформирование с эффектом «памяти формы», либо обычное пластическое течение.

Следует отметить, что коэффициенты n_f и n_b описывают линейное сопротивление деформациям сдвига двойниковых доменов и представляют собой «вторые модули упругости» фаз за пределами прямого и обратного фазовых переходов s_f и s_b.

Особенности геометрии внутренней структуры нестабильного материала могут быть описаны случайными индикаторными изотропными функциями координат $\varkappa_s(\mathbf{r})$, каждая из которых равна единице в точках объема V_s и равна нулю в точках вне этого объема. Очевидно, что имеет место равенство $\varkappa_p(\mathbf{r}) + \varkappa_q(\mathbf{r}) \equiv 1$.

С помощью этих функций закон Гука (1) принимает вид

$$\begin{aligned} &s_{ij}(\mathbf{r}) = 2\big(\mu_p\varkappa_p(\mathbf{r}) + \mu_q\varkappa_q(\mathbf{r})\big)e_{ij}(\mathbf{r}) - 2\mu_q\varkappa_q(\mathbf{r})\omega_{ij}(\mathbf{r}),\\ &\sigma_{ss}(\mathbf{r}) = 3\big(K_p\varkappa_p + K_q\varkappa_q(\mathbf{r})\big)\varepsilon_{ss}(\mathbf{r}). \end{aligned} \tag{3}$$

Здесь $e_{ij} = \varepsilon_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\varepsilon_{ss}$ — девиаторные компоненты тензора полных деформаций, $K_s = \frac{2}{3}\mu_s + \lambda_s$ — объемные модули упругости фаз, $\mathbf{r} = \big(x_1, x_2, x_3\big)$ — радиус-вектор координат. Для определенности принимается, что $\mu_p \leqslant \mu_q$ и $K_p \leqslant K_q$.

Хаотический характер образования и развитие в полном объеме V сферических зародышей новой фазы позволяют отнести индикаторные функции $\varkappa_s(\mathbf{r})$, компоненты тензоров напряжений $\sigma_{ij}(\mathbf{r})$, полных деформаций $\varepsilon_{ij}(\mathbf{r})$ и структурных деформаций $\omega_{ij}(\mathbf{r})$ к статистически однородным и эргодическим полям. Математические ожидания этих величин и их средние значения по полному объему и объемам фаз совпадают [18]:

$$\langle f\rangle = \frac{1}{V}\int_V f(\mathbf{r})d\mathbf{r}, \quad \langle f\rangle_s = \frac{1}{V_s}\int_{V_s} f(\mathbf{r})d\mathbf{r}$$

Здесь индекс s принимает значения p или q. Угловыми скобками обозначена операция осреднения.

Напряженно-деформированное состояние образца, изготовленного из нестабильного материала, может быть представлено в виде макроскопических определяющих уравнений, устанавливающих связь между макроскопическими напряжениями $\langle\sigma_{ij}\rangle$, полными деформациями $\langle\varepsilon_{ij}\rangle$ и структурными деформациями $\langle\omega_{ij}\rangle$. Такие макроскопические определяющие уравнения получаются в результате усреднения по полному объему локального закона Гука (3):

$$\begin{aligned} &\langle s_{ij}\rangle = 2\mu_p\big\langle e_{ij}\big\rangle + 2\big(\mu_q - \mu_p\big)c_q\langle e_{ij}\rangle_q - 2\mu_q c_q\langle\omega_{ij}\rangle_q,\\ &\langle\sigma_{ss}\rangle = 3K_p\big\langle\varepsilon_{ss}\big\rangle + 3\big(K_q - K_p\big)c_q\langle\varepsilon_{ss}\rangle_q. \end{aligned} \tag{4}$$

Здесь $c_s = V_s/V$ — объемное содержание фаз.

Соотношения (4) показывают, что установление макроскопического закона Гука требует исключить усредненные по объему V_q деформации $\langle\varepsilon_{ij}\rangle_q$, выразив их через макроскопические деформации $\langle\varepsilon_{ij}\rangle$.

Для этого к локальному закону Гука (3) следует присоединить систему уравнений равновесия

$$\sigma_{is},_s(\mathbf{r}) = 0 \tag{5}$$

и соотношения Коши

$$2\varepsilon_{ij}(\mathbf{r}) = u_i,_j(\mathbf{r}) + u_j,_i(\mathbf{r}), \tag{6}$$

связывающие компоненты тензора деформаций с компонентами вектора перемещений $u_i(\mathbf{r})$.

Граничными условиями такой системы являются условия отсутствия флуктуаций величин на поверхности S полного объема V:

$$F(\mathbf{r})\big|_{\mathbf{r}\in S} = \langle F\rangle. \tag{7}$$

2. Эффективные модули упругости для постоянной связности составляющих фаз. Исключение из системы уравнений (3), (5) и (6) компонентов тензоров напряжений и деформаций приводит к системе уравнения равновесия микронеоднородной среды в перемещениях [18]:

$$\mu u'_{i},_{ss}(\mathbf{r}) + (\mu+\lambda)u'_{s},_{si}(\mathbf{r}) - \tau'_{is},_{s}(\mathbf{r}) = 0, \tag{8}$$

где

$$\begin{aligned} &\tau_{ij} = t_{ij} + \tfrac{1}{3}\delta_{ij}\tau_{ss},\\ &t_{ij} = -2\mu\big((m_p-1)\varkappa_p + (m_q-1)\varkappa_q\big)e_{ij} + 2\mu_q\varkappa_q\omega_{ij},\\ &\tau_{ss} = -3K\big((k_p-1)\varkappa_p + (k_q-1)\varkappa_q\big)\varepsilon_{ss}, \end{aligned} \tag{9}$$

$$m_p = \frac{\mu_p}{\mu},\quad m_q = \frac{\mu_q}{\mu},\quad k_p = \frac{K_p}{K},\quad k_q = \frac{K_q}{K}.$$

Здесь штрихами ($F' = F - \langle F\rangle$) обозначены флуктуации величин в полном объеме V. Неопределенные величины μ и K удовлетворяют неравенствам

$$\mu_p \leqslant \mu \leqslant \mu_q,\quad K_p \leqslant K \leqslant K_q.$$

В общем случае эти величины зависят от объемных содержаний составляющих компонентов старой и новой фаз. Вид этой зависимости определяет тип связности фаз.

В начале процесса фазового превращения старая фаза играет роль связующей матрицы, а новая фаза представляет собой отдельные включения. По мере роста объема новой фазы может наступить момент, когда обе фазы смогут образовать матричную смесь в виде двух взаимопроникающих каркасов, каждый из которых будет обладать самостоятельной несущей способностью. Наконец, может наступить момент, когда развитая новая фаза станет играть роль связующей матрицы, а старая фаза будет представлять собой совокупность отдельных включений.

С помощью тензора Грина

$$\mathbf{G}_{ik}(\mathbf{r}) = \frac{1}{8\pi\mu}\left(\delta_{ik}r,_{ss} - \frac{3K+5\mu}{3K+8\mu}r,_{ik}\right),\quad r = |\mathbf{r}|,$$

содержащего неопределенные величины μ и K, система (8), (9) с граничными условиями (7) заменяется системой интегральных уравнений, ядрами которых служат вторые производные тензора Грина [18, 19]

$$\varepsilon'_{ij}(\mathbf{r}) = \int_V \mathbf{G}_{ik,lj}(\mathbf{r}-\mathbf{r}_1)\tau'_{kl}(\mathbf{r}_1)d\mathbf{r}_1. \tag{10}$$

Величины $\langle\varepsilon_{ij}\rangle_q$ находятся из известного соотношения [18]

$$\langle\varepsilon_{ij}\rangle_q = \langle\varepsilon_{ij}\rangle + c_q^{-1}\langle\varkappa'\varepsilon'_{ij}\rangle. \tag{11}$$

Подстановка уравнений (10) в соотношения (11) и использование свойства изотропности индикаторных функций $\varkappa_r(\mathbf{r})$ дает

$$\begin{aligned}\langle e_{ij}\rangle_q &= \big(1+\alpha(m_p-1)\big)\xi\langle e_{ij}\rangle + \alpha m_q c_p \xi\langle\omega_{ij}\rangle_q,\\ \langle\varepsilon_{ss}\rangle_q &= \big(1+\gamma(k_p-1)\big)\eta\langle\varepsilon_{ss}\rangle,\end{aligned} \tag{12}$$

где

$$\xi = \frac{1}{1+\alpha\big((m_p-1)+c_p(m_q-m_p)\big)},$$

$$\eta = \frac{1}{1+\gamma\big((k_p-1)+c_p(k_q-k_p)\big)},$$

$$\alpha = \frac{2}{15}\frac{4-5\nu}{1-\nu}, \quad \gamma = \frac{1}{3}\frac{1+\nu}{1-\nu}, \quad \nu = \frac{1}{2}\frac{3K-2\mu}{3K+2\mu}.$$

Подстановка формул (12) в соотношения (4) приводит к макроскопическому закону Гука

$$\begin{aligned}\langle s_{ij}\rangle &= 2\mu^*\langle e_{ij}\rangle - 2\mu^\omega\langle\omega_{ij}\rangle,\\ \langle\sigma_{ss}\rangle &= 3K^*\langle\varepsilon_{ss}\rangle.\end{aligned}$$

Макроскопические структурные деформации $\langle\omega_{ij}\rangle$ могут быть выражены через макроскопические остаточные деформации $\langle e^*_{ij}\rangle$, возникающие при снятии внешних нагрузок с поверхности S полного объема V:

$$\begin{aligned}\langle s_{ij}\rangle &= 2\mu^*\big(\langle e_{ij}\rangle - \langle e^*_{ij}\rangle\big),\\ \langle\sigma_{ss}\rangle &= 3K^*\langle\varepsilon_{ss}\rangle.\end{aligned} \tag{13}$$

Здесь

$$\begin{aligned}\mu^* &= \mu\Big(m_p + c_q(m_q-m_p)\big(1+\alpha(m_p-1)\big)\xi\Big),\\ K^* &= K\Big(k_p + c_q(k_q-k_p)\big(1+\gamma(k_p-1)\big)\eta\Big),\\ \mu^\omega &= \mu_q\big(1-\alpha c_p(m_q-m_p)\xi\big),\\ \langle e^*_{ij}\rangle &= \frac{\mu^\omega}{\mu^*}\langle\omega_{ij}\rangle.\end{aligned} \tag{14}$$

Выбор вида неопределенных величин μ и K существенно влияет на способ взаимодействия между собой объемов старой и новой фаз рассматриваемого нестабильного материала. Фактически этот выбор определяет различные варианты степени связности составляющих фаз и, как следствие, определяет структуру нестабильного композита. Задавая определенным образом величины μ и K, можно получать довольно сложные модели деформирования микронеоднородных сред с изменяемой структурой.

Если, например, в общих формулах (13) и (14) положить $\mu = \mu_p$ и $K = K_p$, то получится модель нестабильной среды, в которой материал старой фазы V_p играет роль связующей матрицы, а материал новой фазы V_q играет роль отдельных включений–зародышей.

Выражения для эффективных модулей упругости (14) принимают вид

$$\begin{aligned} \mu^* &= \mu_p\Big(1 + \frac{c_q(m-1)}{1+\alpha_p c_p(m-1)}\Big), \\ K^* &= K_p\Big(1 + \frac{c_q(k-1)}{1+\gamma_p c_p(k-1)}\Big), \\ \mu^\omega &= \frac{\mu_q}{1+\alpha_p c_p(m-1)}, \end{aligned} \tag{15}$$

где

$$\alpha_p = \frac{2}{15}\frac{4-5\nu_p}{1-\nu_p}, \quad \gamma_p = \frac{1}{3}\frac{1+\nu_p}{1-\nu_p}, \quad \nu_p = \frac{1}{2}\frac{3K-2\mu_p}{3K+2\mu_p}, \quad m = \frac{\mu_q}{\mu_p}, \quad k = \frac{K_q}{K_p}.$$

Если же в общих формулах (14) положить $\mu = \mu_q$ и $K = K_q$, то получится модель композита, в котором, наоборот, второй компонент играет роль связующей матрицы, а первый компонент играет роль отдельных включений. В этом случае выражения для эффективных модулей упругости (14) принимают вид

$$\begin{aligned} \mu^* &= \mu_q\Big(1 + \frac{c_p(1-m)}{m+\alpha_q c_q(1-m)}\Big), \\ K^* &= K_q\Big(1 + \frac{c_p(1-k)}{k+\gamma_q c_q(1-k)}\Big), \\ \mu^\omega &= \mu_p\frac{m+\alpha_q c_q(1-m)}{m+\alpha_q\big(c_q-c_p\big)(1-m)}. \end{aligned} \tag{16}$$

Здесь

$$\alpha_q = \frac{2}{15}\frac{4-5\nu_q}{1-\nu_q}, \quad \gamma_q = \frac{1}{3}\frac{1+\nu_q}{1-\nu_q}, \quad \nu_q = \frac{1}{2}\frac{3K-2\mu_q}{3K+2\mu_q}.$$

Формулы (15) и (16) для μ^* и K^* являются точной верхней и точной нижней оценками Хашина—Штрикмана изотропных эффективных модулей упругости [20,21]. Эти формулы для границ Хашина—Штрикмана могут быть получены из известных теорем теории упругости о минимуме потенциальной энергии и минимуме дополнительной энергии. Вилка Хашина—Штрикмана является существенно более узкой, чем известная вилка Фойгта и Рейсса [20, 21]:

$$\mu_R \leqslant \mu^* \leqslant \mu_F, \quad K_R \leqslant K^* \leqslant K_F,$$

где

$$\begin{aligned} &\mu_F = c_p\mu_p + c_q\mu_q, \quad K_F = c_pK_p + c_qK_q, \\ &\mu_R = \frac{\mu_p\mu_q}{c_p\mu_q + c_q\mu_p}, \quad K_R = \frac{K_pK_q}{c_pK_q + c_qK_p}. \end{aligned} \tag{17}$$

Если в общих формулах (14) принять

$$\mu = \mu_F = \langle \mu \rangle = c_p\mu_p + c_q\mu_q,$$
$$K = K_F = \langle K \rangle = c_p K_p + c_q K_q,$$

то получится модель нестабильного неоднородного материала, в которой старая и новая фазы образуют матричную смесь из двух взаимопроникающих каркасов. В этом случае выражения для эффективных величин (14) принимают вид $\langle \mu \rangle$:

$$\begin{aligned} &\mu^* = \mu_F\Big(m_p^F + c_q(m_q^F - m_p^F)\big(1+\alpha_F(m_p^F-1)\big)\xi_F\Big),\\ &K^* = K_F\Big(k_p^F + c_q(k_q^F - k_p^F)\big(1+\gamma_F(k_p^F-1)\big)\eta_F\Big),\\ &\mu^\omega = \mu_q\big(1-\alpha_F c_p(m_q^F - m_p^F)\xi_F\big), \end{aligned} \tag{18}$$

где

$$\xi_F = \frac{1}{1+\alpha_F\big((m_p^F-1)+c_p(m_q^F-m_p^F)\big)},$$
$$\eta_F = \frac{1}{1+\gamma_F\big((k_p^F-1)+c_p(k_q^F-k_p^F)\big)},$$
$$\alpha_F = \frac{2}{15}\frac{4-5\nu_F}{1-\nu_F}, \quad \gamma = \frac{1}{3}\frac{1+\nu_F}{1-\nu_F}, \quad \nu_F = \frac{1}{2}\frac{3K_F-2\mu_F}{3K_F+2\mu_F},$$
$$m_p^F = \frac{\mu_p}{\mu_F}, \quad m_q^F = \frac{\mu_q}{\mu_F}, \quad k_p^F = \frac{K_p}{K_F}, \quad k_q^F = \frac{K_q}{K_F}.$$

Из формул (18) для эффективных модулей упругости видно, что каждая фаза нестабильной среды обладает самостоятельной несущей способностью и не может быть представлена набором отдельных включений. Так, например, при $\mu_p = K_p = 0$ макроскопические величины μ^* и K^* тождественно в нуль не обращаются. Кроме того, на то, что фазы нестабильного материала образуют матричную смесь, указывает инвариантность формул (18) относительно одновременной перестановки величин (c_p, μ_p, K_p) и (c_q, μ_q, K_q).

Если принять $\mu = \mu^*$ и $K = K^*$, то соотношения (14) относительно эффективных модулей нестабильной среды превращаются в уравнения так называемой самосогласованной модели:

$$\begin{aligned} &m_p^* + c_q(m_q^* - m_p^*)\big(1+\alpha^*(m_p^*-1)\big)\xi^* = 1,\\ &k_p^* + c_q(k_q^* - k_p^*)\big(1+\gamma^*({}^*k_p-1)\big)\eta^* = 1,\\ &\mu^\omega = \mu_q\big(1-\alpha^* c_p(m_q^* - m_p^*)\big)\xi^*. \end{aligned} \tag{19}$$

Здесь

$$\xi^* = \frac{1}{1+\alpha^*\big((m_p^*-1)+c_p(m_q^*-m_p^*)\big)},$$
$$\eta^* = \frac{1}{1+\gamma^*\big((k_p^*-1)+c_p(k_q^*-k_p^*)\big)},$$
$$\alpha^* = \frac{2}{15}\frac{4-5\nu^*}{1-\nu^*}, \quad \gamma^* = \frac{1}{3}\frac{1+\nu^*}{1-\nu^*}, \quad \nu^* = \frac{1}{2}\frac{3K^*-2\mu^*}{3K^*+2\mu^*},$$
$$m_p^* = \frac{\mu_p}{\mu^*}, \quad m_q^* = \frac{\mu_q}{\mu^*}, \quad k_p^* = \frac{K_p}{K^*}, \quad k_q^* = \frac{K_q}{K^*}.$$

В общем случае связанные уравнения (19) приходится решать численно.

На рис. 1 представлены кривые верхних и нижних границ Фойгта и Рейсса, кривые верхних и нижних границ Хашина—Штрикмана, показана кривая эффективного модуля упругости сдвига матричной смеси.

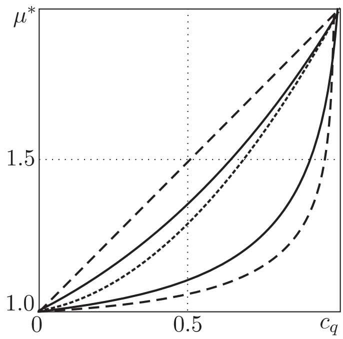


Рис. 1. Штриховыми линиями показаны верхние и нижние границы Фойгта и Рейсса для эффективных модулей упругости сдвига, рассчитанные по формулам (17), сплошными линиями показаны верхние и нижние границы Хашина—Штрикмана для эффективных модулей упругости сдвига, рассчитанные по формулам (15) и (16), пунктирной линией показана кривая модуля упругости сдвига для эффективного модуля упругости сдвига матричной смеси, рассчитанная по формулам (18). Значения для расчета: $\mu_p = 1$, $\nu_p = 0.35$, $\mu_q = 2$, $\nu_q = 0.25$

[Figure 1. The dashed lines show the upper and lower Voigt and Reuss bounds for the effective shear moduli calculated by Eq. (17). The solid lines show the upper and lower Hashin–Shtrikman bounds for effective shear moduli calculated by Eqs. (15) and (16). The dotted line shows the shear modulus of the shear modulus for the effective shear modulus calculated by Eq. (18). Values for calculation: $\mu_p = 1$, $\nu_p = 0.35$, $\mu_q = 2$, $\nu_q = 0.25$]

3. Эффективные модули упругости для переменной связности составляющих фаз. В самом общем случае вид неопределенных модулей упругости μ и K может быть представлен соотношениями

$$\begin{aligned} \mu = \mu_w = w_p(c_p)\mu_p + w_q(c_q)\mu_q, \\ K = K_w = w_p(c_p)K_p + w_q(c_q)K_q. \end{aligned} \tag{20}$$

Здесь величины w_p и w_q — монотонно возрастающие функции, описывающие связность составляющих компонентов композитов и удовлетворяющие следующим условиям:

$$\begin{gathered} 0 \leqslant w_p(c_p) \leqslant 1, \quad w_p(0) = 0, \quad w_p(1) = 1, \\ 0 \leqslant w_q(c_q) \leqslant 1, \quad w_q(0) = 0, \quad w_q(1) = 1, \\ w_p(c_p) + w_q(c_q) \equiv 1. \end{gathered}$$

Очевидно, что при малых объемных содержаниях новой фазы нестабильного материала возникающие в нем включения-зародыши практически не влияют друг на друга. Связность новой и старой фаз нестабильного материала на этом этапе является минимальной и взаимодействием зародышей между собой можно пренебречь.

В этом случае функция $w_q(c_q)$ будет принимать значения, близкие к нулю, а основной вклад в несущую способность композита будет проявлять в форме связующей матрицы старая фаза, содержащая хаотически распределенные включения-зародыши новой фазы.

Такая ситуация схематично показана на рис. 2, *a*, где зародыши новой фазы изображены в виде черных кружков.

С ростом объемной концентрации новой фазы c_q и значений функции $w_q(c_q)$ взаимодействие между собой отдельных включений-зародышей возрастает, они начинают образовывать группы и структуры, из которых в конце

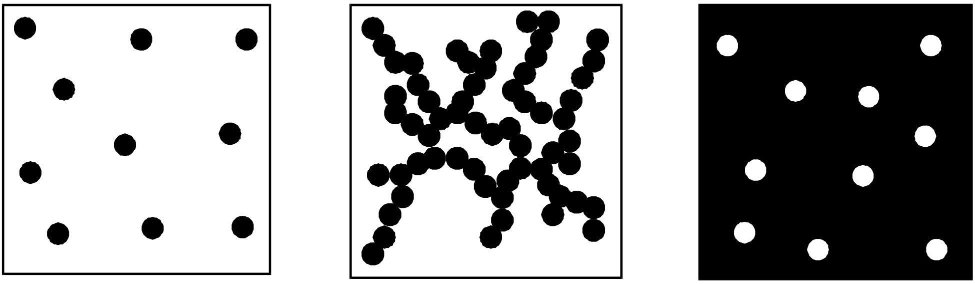


Рис. 2. Малые объемные содержания новой фазы (a); матричная смесь составляющих фаз (b); малые объемные содержания старой фазы (c)

[Figure 2. Small volume contents of the new phase (a); a matrix mixture of the constituent phases (b); small volumetric contents of the old phase (c)

концов складывается фазовая матричная смесь в виде взаимопроникающих каркасов. Такой вариант схематично представлен на рис. 2, b.

Для значений объемной концентрации второй фазы c_q близких к единице старая и новая фазы нестабильного материала меняются функциональными ролями. Новая фаза V_q образует связующую матрицу, а от старой фазы V_p остаются отдельные включения, взаимодействием которых между собой можно пренебречь. Функция $w_q(c_q)$ станет принимать значения, близкие к единице, а функция $w_p(c_p)$ станет принимать значения, близкие к нулю. Такой вариант схематично представлен на рис. 2, c. Здесь хаотически распределенные включения первого компонента изображены в виде белых кружков.

Процесс вытеснения новой фазой нестабильного материала старой фазы $V_q \to V$ или $c_q \to 1$ можно описать кинетическим уравнением, для построения которого целесообразно ввести вспомогательную переменную

$$u = \frac{c_q}{1 - c_q}, \tag{21}$$

определяющую протяженность процесса изменения связности компонентов композита. При изменении объемного содержания второй фазы $c_q = u/(1+u)$ от нуля до единицы вспомогательная переменная изменяется на полубесконечном интервале $0 \leqslant u < +\infty$.

Процесс возникновения зародышей новой фазы, их рост и развитие в сложные матричные структуры, окончательное вытеснение старой фазы могут быть описаны кинетическим уравнением с начальным условием, полученным в работе [22]

$$\begin{gathered} \frac{dw_q}{du} = \big(A + Bw_q\big)\big(1 - w_q^{\lambda}\big), \\ w_q(0) = 0 \end{gathered} \tag{22}$$

относительно функции

$$w_q(c_q) = w_q\Big(\frac{u}{1+u}\Big) = w_q(u).$$

Здесь A — коэффициент, описывающий взаимодействие между собой включений-зародышей на начальном этапе развития новой фазы; B — коэффициент, описывающий последующее интенсивное взаимодействие между собой включений-зародышей и формирование из них групп матричных смесей новой фазы.

Множитель $(1 - w_q^\lambda)$ уравнения (22) отвечает за процесс насыщения, при котором образование новой фазы замедляется, старая и новая фаза нестабильного материала меняются функциональными ролями, новая фаза V_q образует связующую матрицу, а от старой фазы V_p остаются отдельные включения, взаимодействием которых между собой можно пренебречь.

При этом параметр λ описывает интенсивность стремления функции

$$\varphi_q = (1 - w_q^\lambda)$$

к своему предельному нулевому значению.

На рис. 3 представлено семейство кривых графиков функции φ_q в зависимости от параметра λ.

Исключение с помощью формулы (20) вспомогательной переменной u позволяет записать кинетическое уравнение (21) относительно объемного содержания новой фазы c_q:

$$\begin{gathered} \frac{dw_q}{dc_q} = \frac{A + Bw_q}{(1 - c_q)^2}(1 - w_q^\lambda), \\ w_q\big|_{c_q=0} = 0. \end{gathered} \tag{23}$$

На рис. 4 представлена интегральная кривая для функции $w_q(c_q)$, построенная по результатам численного решения задачи Коши (23).

Соотношения для усредненных деформаций (12) принимают вид

$$\begin{aligned} &\langle e_{ij}\rangle_q = \big(1 + \alpha_w(m_p^w - 1)\big)\xi_w\langle e_{ij}\rangle + \alpha_w m_q^w c_p \xi_w \langle\omega_{ij}\rangle_q, \\ &\langle\varepsilon_{ss}\rangle_q = \big(1 + \gamma_w(k_p^w - 1)\big)\eta_w\langle\varepsilon_{ss}\rangle. \end{aligned} \tag{24}$$

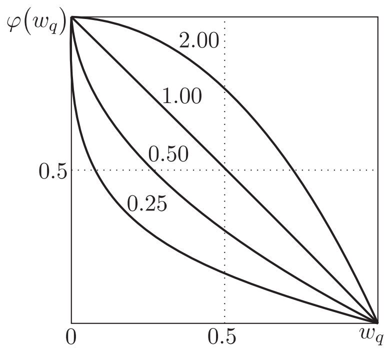


Рис. 3. Графики функции $\varphi_q = (1 - w_q^\lambda)$ для различных значений параметра λ. Цифры у кривых — значения параметра λ

[Figure 3. The graphs of the family of functions $\varphi_q = (1 - w_q^\lambda)$ for different values of the parameter λ. The numbers of the curves are the values of the parameter λ]

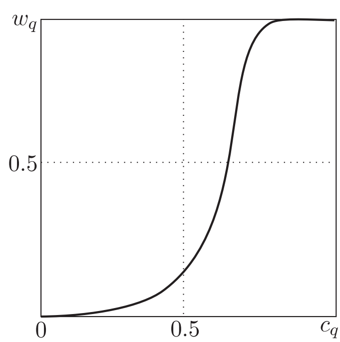


Рис. 4. Интегральная кривая решения задачи Коши (23). Значения для расчета: $A = 0.05$, $B = 2.00$, $\lambda = 1.25$

[Figure 4. The integral curve of the solution for the Cauchy problem (23). Values for calculation: $A = 0.05$, $B = 2.00$, $\lambda = 1.25$]

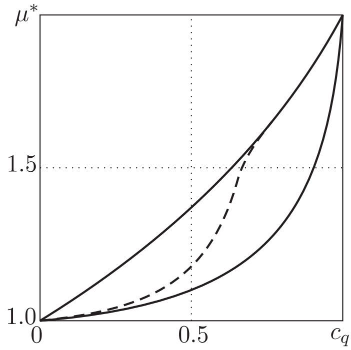


Рис. 5. Модуль упругости сдвига (штриховая линия) нестабильного материала, вычисленный по формулам (23) и (26), и вилка Хашина—Штрикмана (сплошные линии). Значения для расчета: $\mu_p = 1$, $\nu_p = 0.35$, $\mu_q = 2$, $\nu_q = 0.25$

[Figure 5. The modulus of shear elasticity (dashed line) of the unstable material calculated by Eqs. (24), (26), and Hashin–Shtrikman bounds (solid lines). Values for calculation: $\mu_p = 1$, $\nu_p = 0.35$, $\mu_q = 2$, $\nu_q = 0.25$]

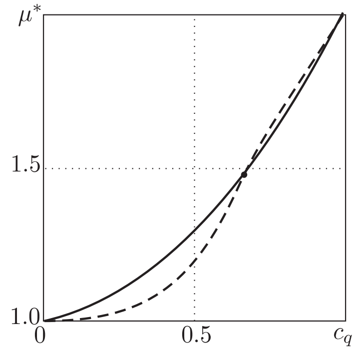


Рис. 6. Эффективный модуль упругости сдвига (штриховая линия) композита, вычисленный по формулам (23) и (26), и эффективный модуль упругости сдвига (сплошная линия) матричной смеси, вычисленный по формулам (18). Значения для расчета: $\mu_p = 1$, $\nu_p = 0.35$, $\mu_q = 2$, $\nu_q = 0.25$.

[Figure 6. The effective shear modulus (dashed line) of composite calculated by Eqs. (24), (26), and the effective shear modulus (solid line) of the mixture calculated by Eq. (18). Values for calculation: $\mu_p = 1$, $\nu_p = 0.35$, $\mu_q = 2$, $\nu_q = 0.25$]

Здесь

$$\xi_w = \frac{1}{1 + \alpha_w\big((m_p^w - 1) + c_p(m_q^w - m_p^w)\big)},$$
$$\eta_w = \frac{1}{1 + \gamma_w\big((k_p^w - 1) + c_p(k_q^w - k_p^w)\big)},$$
$$\alpha_w = \frac{2}{15}\frac{4 - 5\nu_w}{1 - \nu_w}, \quad \gamma_w = \frac{1}{3}\frac{1 + \nu_w}{1 - \nu_w}, \quad \nu_w = \frac{1}{2}\frac{3K_w - 2\mu_w}{3K_w + 2\mu_w},$$
$$m_p^w = \frac{\mu_p}{\mu_w}, \quad m_q^w = \frac{\mu_q}{\mu_w}, \quad k_p^w = \frac{K_p}{K_w}, \quad k_q^w = \frac{K_q}{K_w}.$$

Формулы для эффективных модулей упругости (14) записываются в виде

$$\begin{aligned}
&\mu^* = \mu_w\big(m_p^w + c_q(m_q^w - m_p^w)\big(1 + \alpha_w(m_p^w - 1)\big)\xi_w\big),\\
&K^* = K_w\big(k_p^w + c_q(k_q^w - k_p^w)\big(1 + \gamma_w(k_p^w - 1)\big)\eta_w\big),\\
&\mu^\omega = \mu_q\big(1 - \alpha_w c_p(m_q^w - m_p^w)\xi_w\big).
\end{aligned} \tag{25}$$

Вычисления эффективных характеристик нестабильного материала по формулам (25) следует выполнять с учетом решения уравнения (23).

На рис. 5 штриховой линией показана кривая модуля упругости сдвига, рассчитанная по формулам (23) и (26) и расположенная в вилке сплошных линий верхней и нижней границ Хашина—Штрикмана.

Расположение этой штриховой линии показывает, что при малых значениях объемного содержания новой фазы c_q значения эффективного модуля нестабильного материала практически совпадают с нижней границей Хашина—Штрикмана. При значениях объемного содержания новой фазы c_q, близких к единице, значения эффективного модуля упругости композита практически совпадают с верхней границей Хашина—Штрикмана.

На рис. 6 штриховой линией показана кривая эффективного модуля упругости сдвига композита, рассчитанного по формулам (23) и (26). Сплошной линией показана кривая эффективного модуля упругости сдвига для матричной смеси, рассчитанного по формулам (18).

Из сравнения этих кривых следует, что до определенного уровня объемного содержания второго компонента, отмеченного на рис. 6 точкой, взаимодействие и связность компонентов композита ниже, чем у матричной смеси. После этого уровня, при котором взаимодействие и связность компонентов композита совпадают со связностью матричной смеси, значения эффективного модуля упругости сдвига композита превосходят значения эффективного модуля упругости сдвига матричной смеси.

4. Эффективные характеристики сверхупругого деформирования нестабильного материала. Определяющие макроскопические уравнения упрочнения и разупрочнения нестабильного материала для прямого и обратного фазовых переходов находятся усреднением локальных пороговых условий (2) по объему новой фазы V_q:

$$\big(\langle s_{ij}\rangle_q - 2n_{f,b}\langle\omega_{ij}\rangle_q\big)\big(\langle s_{ij}\rangle_q - 2n_{f,b}\langle\omega_{ij}\rangle_q\big) = s^2_{f,b}. \tag{26}$$

Уравнениям поверхностей (26) в шестимерном пространстве напряжений соответствует ассоциированный закон деформирования

$$\langle s_{ij}\rangle_q = s_{f,b}\cdot\frac{\langle\dot\omega_{ij}\rangle}{\sqrt{\langle\dot\omega_{kl}\rangle\langle\dot\omega_{kl}\rangle}} + 2n_{f,b}\cdot\langle\omega_{ij}\rangle_q. \tag{27}$$

Исключение девиаторных компонентов тензора напряжений $\langle s_{ij}\rangle_q$ из соотношений (27) с помощью локального закона Гука (1) дает

$$2\mu_q\big(\langle e_{ij}\rangle_q - \langle\omega_{ij}\rangle_q\big) - 2n_{f,b}\langle\omega_{ij}\rangle_q = s_{f,b}\cdot\theta_{ij},$$

или

$$2\mu_q\langle e_{ij}\rangle_q - 2(\mu_q + n_{f,b})\langle\omega_{ij}\rangle_q = s_{f,b}\cdot\theta_{ij}. \tag{28}$$

Здесь

$$\theta_{ij} = \frac{\langle\dot\omega_{ij}\rangle_q}{\sqrt{\langle\dot\omega_{kl}\rangle_q\langle\dot\omega_{kl}\rangle_q}} = \frac{\langle\dot\omega_{ij}\rangle}{\sqrt{\langle\dot\omega_{kl}\rangle\langle\dot\omega_{kl}\rangle}},$$

точкой обозначены скорости компонентов тензора структурных деформаций ω_{ij}.

Подстановка в уравнения (28) формул (24) приводит к соотношениям

$$\big(1+\alpha_w(m_p^w-1)\big)\xi_w\langle e_{ij}\rangle + \left(\alpha_w m_q^w c_p\xi_w - \left(1+\frac{n_{f,b}}{\mu_q}\right)\right)\langle\omega_{ij}\rangle_q = \frac{s_{f,b}}{2\mu_q}\cdot\langle\theta_{ij}\rangle.$$

Исключение макродеформаций $\langle e_{ij}\rangle$ из этого соотношения и макроскопического закона Гука (13) дает

$$\big(1+\alpha_w(m_p^w-1)\big)\xi_w\Big(\frac{\langle s_{ij}\rangle}{2\mu^*}+\langle e_{ij}^*\rangle\Big)+ \\ +\Big(\alpha_w m_q^w c_p\xi_w-\Big(1+\frac{n_{f,b}}{\mu_q}\Big)\Big)\frac{\mu^*}{c_q\mu^\omega}\langle e_{ij}^*\rangle=\frac{s_{f,b}}{2\mu_q}\cdot\langle\theta_{ij}\rangle,$$

или

$$\big(1+\alpha_w(m_p^w-1)\big)\xi_w\langle s_{ij}\rangle+2\mu^*\big(1+\alpha_w(m_p^w-1)\big)\xi_w+ \\ +\Big(\alpha_w m_q^w c_p\xi_w-\Big(1+\frac{n_{f,b}}{\mu_q}\Big)\Big)\frac{\mu^*}{c_q\mu^\omega}\langle e_{ij}^*\rangle=s_{f,b}\cdot\frac{\mu^*}{\mu_q}\cdot\theta_{ij}. \quad (29)$$

Таким образом, соотношения (29) записываются в виде макроскопического закона деформирования:

$$\langle s_{ij}\rangle=s_{f,b}^*\theta_{ij}+2n_{f,b}^*e_{ij}^*. \quad (30)$$

Ассоциированная с законом деформирования (30) поверхность кинематического упрочнения имеет вид

$$\big(\langle s_{ij}\rangle-2n_{f,b}^*e_{ij}^*\big)\big(\langle s_{ij}\rangle-2n_{f,b}^*e_{ij}^*\big)=s_{f,b}^{*2}, \quad (31)$$

где

$$s_{f,b}^*=s_{f,b}\cdot\frac{\mu^*}{\mu_q}\cdot\frac{1}{\big(1+\alpha_w(m_p-1)\big)\xi_w} \quad (32)$$

— эффективные пределы прямого и обратного фазовых переходов,

$$n_{f,b}^*=\mu^*\Big(\frac{s_{f,b}^*}{c_q s_{f,b}}\Big(\frac{1-\alpha_w(1-c_q m_p)}{1+\alpha_w(m_p-1)}+\frac{n_{f,b}}{\mu^\omega}\Big)-1\Big) \quad (33)$$

— эффективный коэффициент упрочнения, характеризующий скорость перемещения поверхности (31) в шестимерном пространстве макронапряжений.

Для малых объемных концентраций новой фазы c_q формулы (31)–(33) принимают вид

$$\begin{aligned} s_{f,b}^*&=s_{f,b}\cdot\Big(\frac{1}{m}+(\alpha_p c_p+c_q)\Big(1-\frac{1}{m}\Big)\Big),\\ n_{f,b}^*&=\mu^*\Big(\frac{s_{f,b}^*}{c_q s_{f,b}}\Big((1-\alpha c_p)+\frac{n_{f,b}}{\mu_q}(1+\alpha c_p(m-1))\Big)-1\Big). \end{aligned} \quad (34)$$

При $n_F=n_b=0$ формулы (34) совпадают с выражениями, полученными в работе [19].

Определяющие уравнения (31) с эффективными параметрами (32) и (33) представляют собой макроскопический закон нелинейного упрочнения рассматриваемого нестабильного материала.

Для определения величин $\langle\omega_{ij}\rangle_q$ необходимо сформулировать уравнение изменения средних структурных деформаций в зависимости от изменения объемного содержания новой фазы c_q.

В процессе фазового превращения можно условно выделить два этапа. На первом этапе происходит интенсивное образование отдельных зон новой фазы в виде зародышей. Для этого этапа характерен достаточно быстрый рост объемного содержания зародышей и относительно медленный рост уровня структурных деформаций. Затем, на втором этапе, прирост объемного содержания новой фазы осуществляется в основном за счет увеличения объемов самих зародышей, внутри которых структурные деформации развиваются до своих максимальных значений. Разумеется, выделение таких двух последовательных этапов в процессе фазового превращения является достаточно условным. На самом деле различные элементы обоих этапов могут наблюдаться одновременно, а на разных стадиях развития уровней структурных деформаций может наблюдаться преобладание одного из них над другим [23].

Объемное содержание новой фазы удовлетворяет неравенству $0 \leqslant c_q \leqslant 1$, а величина

$$\Omega = \sqrt{\langle \omega_{ij} \rangle_q \cdot \langle \omega_{ij} \rangle_q}$$

удовлетворяет неравенству

$$0 \leqslant \Omega \leqslant \Omega^{\max},$$

где

$$\Omega^{\max} = \sqrt{\omega_{ij}^{\max} \cdot \omega_{ij}^{\max}}.$$

Очевидно, что величина отношения $\omega = \Omega/\Omega^{\max}$ удовлетворяет неравенству $0 \leqslant \omega \leqslant 1$.

Вспомогательная переменная

$$\xi = \frac{\Omega}{\Omega - \Omega^{\max}} = \frac{\omega}{1 - \omega} \tag{35}$$

изменяется на полубесконечном интервале $0 \leqslant \xi < \infty$ и описывает протяженность процесса фазового перехода $V_q \to V$. Значение параметра $\xi = 0$ соответствует началу процесса фазового превращения и отсутствию новой фазы, а неограниченное увеличение параметра $\xi \to \infty$ соответствует асимптотическому приближению к концу процесса фазового превращения и исчезновению старой фазы. Соответственно, значение $\omega = 0$ отвечает началу процесса фазового превращения и отсутствию новой фазы, а значение $\omega = 1$ отвечает концу процесса фазового превращения и отсутствию старой фазы.

Процесс возникновения и развития новой фазы может быть описан кинетическим уравнением роста объемного содержания новой фазы c_q в зависимости от переменной (35):

$$\frac{dc_q(\xi)}{d\xi} = \vartheta(\xi)\big(a + bc_q(\xi)\big)\big(1 - c_q(\xi)\big). \tag{36}$$

Здесь a — коэффициент, описывающий возникновение и начальное развитие новой фазы на первом этапе; b — коэффициент последующего интенсивного роста объемного содержания новой фазы; множитель $(1 - c_q)$ отвечает за процесс насыщения, при котором образование новой фазы замедляется и происходит в основном за счет объемного роста самих зародышей, внутри которых структурные деформации ω_{ij} развиваются до своих максимальных значений. Функция $\vartheta(\xi)$ задает удельную скорость роста объемного содержания новой фазы и описывает особенности процесса фазовых превращений, связанных с возможным неоднородным распределением зародышей новой фазы в пространстве. Она принимает значения на единичном интервале $0 \leqslant \vartheta(\xi) \leqslant 1$.

Начальное условие для уравнения (36) имеет вид

$$c_q\Big|_{\xi=0} = 0. \tag{37}$$

Решение задачи Коши (36) и (37) запишется следующим образом:

$$c_q(\xi) = a \cdot \frac{\exp\left((a+b)\displaystyle\int_0^{\xi}\vartheta(x)dx\right) - 1}{a\exp\left((a+b)\displaystyle\int_0^{\xi}\vartheta(x)dx\right) + b}. \tag{38}$$

Если процесс возникновения и развития зародышей новой фазы является однородным и равномерным $\vartheta(\xi) \equiv 1$, то соотношение (38) принимает вид

$$c_q(\xi) = a \cdot \frac{\exp\big((a+b)\xi\big) - 1}{a\exp\big((a+b)\xi\big) + b}. \tag{39}$$

Возвращаясь в соотношении (39) к переменной ω из формулы (35), находим

$$c_q(\omega) = a \cdot \frac{\exp\Big((a+b)\dfrac{\omega}{1-\omega}\Big) - 1}{a\exp\Big((a+b)\dfrac{\omega}{1-\omega}\Big) + b}. \tag{40}$$

На рис. 7 показаны кривые роста объемного содержания c_q от уровня структурных деформаций ω, построенные по формуле (40).

Формула (40) описывает так называемую логистическую кривую, график которой до определенной концентрации зародышей является вогнутым и соответствует прогрессирующему росту новой фазы, а затем становится выпуклым, что соответствует процессу насыщения и замедленному росту новой фазы.

Применим полученные результаты для расчета диаграмм сверхупругого одноосного осесимметричного растяжения (сжатия) образцов из нестабильных сплавов β-Cu-Zn и Au-Cd [24, 25].

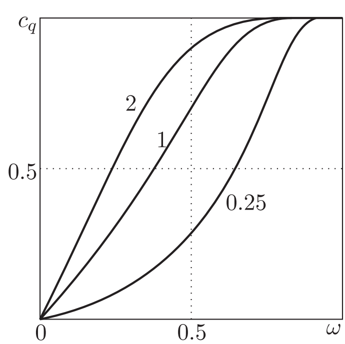


Рис. 7. Кривые зависимости роста объемного содержания c_q от уровня структурных деформаций ω, построенные по формуле (40) для различных значений параметра a. Расчетное значение параметра $b = 0.5$. Цифры у кривых — значения параметра a

[Figure 7. The curves of the dependence of the growth of the volume content c_q on the level of structural deformations of ω, calculated by Eq. (40) for various values of the parameter a, when $b = 0.5$. The labels of the curves are the values of the parameter a]

Пусть только один из компонентов тензора макроскопических напряжений отличен от нуля $\langle\sigma_{11}\rangle \neq 0$, а остальные компоненты обращаются в нуль $\langle\sigma_{ij}\rangle = 0$ $(i \neq 1,\, j \neq 1)$.

Из всех компонентов тензоров макроскопических полных деформаций $\langle\varepsilon_{ij}\rangle$ и макроскопических остаточных деформаций e^*_{ij} от нуля будут отличны величины с одинаковыми индексами $\langle\varepsilon_{11}\rangle$, $\langle\varepsilon_{22}\rangle$, $\langle\varepsilon_{33}\rangle$ и e^*_{11}, e^*_{22},e^*_{33}. При этом в силу осесимметричности задачи имеют место соотношения $\langle\varepsilon_{22}\rangle = \langle\varepsilon_{33}\rangle$ и $e^*_{22} = e^*_{33}$.

Условие несжимаемости для остаточных деформаций

$$e^*_{ss} = e^*_{11} + e^*_{22} + e^*_{33} = 0$$

позволяет заключить, что

$$e^*_{22} = e^*_{33} = -\frac{1}{2}e^*_{11}.$$

В области упругого деформирования макроскопические поперечные деформации $\langle\varepsilon_{22}\rangle = \langle\varepsilon_{33}\rangle$ выражаются через макроскопические продольные деформации $\langle\varepsilon_{11}\rangle$ с помощью эффективного коэффициента Пуассона ν^*:

$$\langle\varepsilon_{22}\rangle = \langle\varepsilon_{33}\rangle = -\frac{1}{2}\nu^*\langle\varepsilon_{11}\rangle,$$

где $\nu^* = \dfrac{3K^* - 2\mu^*}{6K^* + 2\mu^*}$.

Макроскопический закон Гука (13) и макроскопический закон упрочнения (30) в случае одноосного растяжения(сжатия) принимают вид

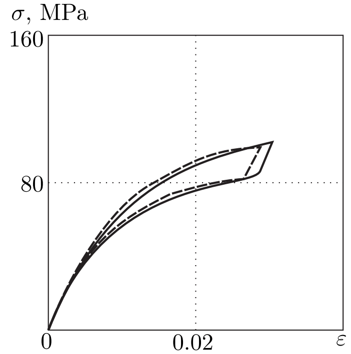
$$\begin{aligned} &\sigma = E^*\varepsilon, && \varepsilon \leqslant \varepsilon^*_{f,b}, \\ &\sigma = \frac{E^*}{E^* + 3n^*_{f,b}}\sigma^*_{f,b} + \frac{3E^*n^*_{f,b}}{E^* + 3n^*_{f,b}}\varepsilon, && \varepsilon \geqslant \varepsilon^*_{f,b}, \end{aligned} \tag{41}$$

где $\sigma = \langle\sigma_{11}\rangle$ и $\varepsilon = \langle\varepsilon_{11}\rangle$ — одноосные макроскопические напряжения и деформации; $\sigma^*_{f,b} = \sqrt{3/2}s^*_{f,b}$ — пределы прямого и обратного фазовых переходов при одноосном нагружении; $\varepsilon^*_{f,b} = \sigma^*_{f,b}/E^*$ — значения макроскопических одноосных деформаций, разделяющих зоны упругого и сверхупругого деформирования.

На рис. 8 представлены сравнения теоретических расчетов, выполненных по формулам (41), с экспериментальными диаграммами сверхупругого поведения сплавов β-Cu-Zn [24].

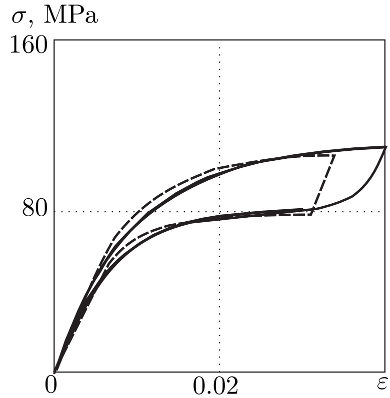
На рис. 9 представлены сравнения данных теоретических расчетов, выполненных по формулам (41), с экспериментальными диаграммами сверхупругого поведения сплавов Au-Cd [25].

Рис. 8. Сравнение теоретических расчетов по построенной модели с экспериментальными диаграммами сверхупругого поведения сплавов β-Cu-Zn [24]. Сплошная линия — экспериментальная кривая; штриховая линия — теоретическая кривая. Значения для расчета: $E = 11248.02$ МПа, $\nu = 0.30$, $\sigma_F = 10.79$ МПа, $\sigma_b = 2.4$ МПа, $n_F = 1177.20$ МПа, $n_b = 981.01$ МПа, $a = 2.00$, $b = 0.05$, $\omega^{\max} = 0.05$



[Figure 8. Comparison of theoretical calculations for the constructed model with experimental diagrams of the superelastic behavior of the β-Cu-Zn alloys [24]. The solid line is the experimental curve; the dashed line is the theoretical curve. Values for calculation: $E = 11248.02$ MPa, $\nu = 0.30$, $\sigma_F = 10.79$ MPa, $\sigma_b = 2.45$ MPa, $n_F = 1177.20$ MPa, $n_b = 981.01$ MPa, $a = 2.00$, $b = 0.05$, $\omega^{\max} = 0.05$]

Рис. 9. Сравнение теоретических расчетов по построенной модели с экспериментальными диаграммами сверхупругого поведения сплавов Au-Cd [25]. Сплошная линия — экспериментальная кривая; штриховая линия — теоретическая кривая. Значения для расчета: $E = 11398.14$ МПа, $\nu = 0.30$, $\sigma_F = 12.26$ МПа, $\sigma_b = 1.96$ МПа, $n_F = 1196.82$ МПа, $n_b = 922.14$ МПа, $a = 2.00$, $b = 0.05$, $\omega^{\max} = 0.04$



[Figure 9. Comparison of theoretical calculations for the constructed model with experimental diagrams of the superelastic behavior of the Au-Cd alloys [25]. The solid line is the experimental curve; the dashed line is the theoretical curve. Values for calculation: $E = 11398.14$ MPa, $\nu = 0.30$, $\sigma_F = 12.26$ MPa, $\sigma_b = 1.96$ MPa, $n_F = 1196.82$ MPa, $n_b = 922.14$ MPa, $a = 2.00$, $b = 0.05$, $\omega^{\max} = 0.04$]

Заключение. Разработана новая математическая модель изотермического фазового перехода первого рода в нестабильной однородной упругой среде, которая описывает образование и развитие новой фазы внутри старой фазы.

Возникающая сначала в виде отдельных включений-зародышей новая фаза образует впоследствии структуры матричной смеси в виде взаимопроникающих каркасов, и, наконец, новая фаза образует матрицу с отдельными включениями из материала остатков старой фазы.

Вычислены эффективные модули упругости нестабильного материала с изменяемой структурой. Показано, что значения этих модулей лежат внутри верхней и нижней границ Хашина—Штрикмана.

Сформулировано кинетическое уравнение роста структурных деформаций в зависимости от роста объема новой фазы.

Установлены макроскопические условия прямого и обратного фазовых переходов, вычислены их эффективные пределы и коэффициенты упрочнения.

Численный анализ построенных моделей показал хорошее соответствие расчетных данных известным экспериментальным данным.

Конкурирующие интересы. Мы не имеем конкурирующих интересов.

Авторский вклад и ответственность. Все авторы принимали участие в разработке концепции статьи и в написании рукописи. Авторы несут полную ответственность за предоставление окончательной рукописи в печать. Окончательная версия рукописи была одобрена всеми авторами.

Финансирование. Исследование выполнялось без финансирования.

Библиографический список

1. Исупова И. Л., Трусов П. В. Математическое моделирование фазовых превращений в сталях при термомеханической нагрузке // *Вестник ПНИПУ. Механика*, 2013. № 3. С. 126–156.
2. Мишустин И. В., Мовчан А. А. Моделирование фазовых и структурных превращений в сплавах с памятью формы, происходящих под действием немонотонно меняющихся напряжений // *Изв. РАН. МТТ*, 2014. № 1. С. 37–53.
3. Мишустин И. В., Мовчан А. А. Аналог теории пластического течения для описания деформации мартенситной неупругости в сплавах с памятью формы // *Изв. РАН. МТТ*, 2015. № 2. С. 78–95.
4. Казарина С. А., Мовчан А. А., Сильченко А. Л. Экспериментальное исследование взаимодействия фазовых и структурных деформаций в сплавах с памятью формы // *Механика композиционных материалов и конструкций*, 2016. Т. 22, № 1. С. 85–98.
5. Мовчан А. А., Сильченко А. Л.. Казарина С. А. Экспериментальное исследование и теоретическое моделирование эффекта перекрестного упрочнения сплавов с памятью формы // *Деформация и разрушение материалов*, 2017. № 3. С. 20–27.
6. Трусов П. В., Волегов П. С., Исупова И. Л., Кондратьев Н. С., Макаревич Е. С., Няшина Н. Д., Останина Т. В., Шарифуллина Э. Р. Многоуровневая модель для описания твердотельных фазовых превращений в многокомпонентных сплавах // *Вестник Пермского научного центра УРО РАН*, 2016. № 4. С. 83–90.
7. Тихомирова К. А. Изотермическое деформирование сплава с памятью формы в разных температурных интервалах. Случай одноосного растяжения // *Механика композиционных материалов и конструкций*, 2017. Т. 23, № 2. С. 263–282.
8. Тихомирова К. А. Феноменологическое моделирование фазовых и структурных деформаций в сплавах с памятью формы. Одномерный случай // *Вычислительная механика сплошных сред*, 2018. Т. 11, № 1. С. 36–50. doi: 10.7242/1999-6691/2018.11.1.4.
9. Тихомирова К. А. Экспериментальное и теоретическое исследование взаимосвязи фазовой и структурной деформаций в сплавах с памятью формы // *Вестник ПНИПУ. Механика*, 2018. № 1. С. 40–57. doi: 10.15593/perm.mech/2018.1.04.
10. Mutter D., Nielaba P. Simulation of the shape memory effect in a NiTi nano model system // *J. All. Compounds*, 2013. vol. 577. pp. S83–S87, arXiv: 1202.1078 [cond-mat.mtrl-sci]. doi: 10.1016/j.jallcom.2012.01.095.
11. Auricchio F., Bonetti E., Scalet G., Ubertini F. Theoretical and numerical modeling of shape memory alloys accounting for multiple phase transformations and martensite reorientation // *Int. J. Plasticity*, 2014. vol. 59. pp. 30–54. doi: 10.1016/j.ijplas.2014.03.008.
12. Yu C., Kang G., Kan Q. Crystal plasticity based constitutive model of NiTi shape memory alloy considering different mechanisms of inelastic deformation // *Int. J. Plasticity*, 2014. vol. 54. pp. 132–162. doi: 10.1016/j.ijplas.2013.08.012.
13. Elibol C., Wagner M. F.-X. Investigation of the stress-induced martensitic transformation in pseudoelastic NiTi under uniaxial tension, compression and compression–shear // *Mat. Sci. Eng. A*, 2015. vol. 621. pp. 76–81. doi: 10.1016/j.msea.2014.10.054.
14. Lobo P. S., Almeida J., Guerreiro L. Shape memory alloys behaviour: A review // *Procedia Engineering*, 2015. vol. 114. pp. 776–783. doi: 10.1016/j.proeng.2015.08.025.
15. Yoo Y.-I., Kim Y.-J., Shin D.-K., Lee J.-J. Development of martensite transformation kinetics of NiTi shape memory alloys under compression // *Int. J. Sol. Struct.*, 2015. vol. 64–65. pp. 51–61. doi: 10.1016/j.ijsolstr.2015.03.013.

16. Cisse C., Zaki W., Zineb T. B. A review of constitutive models and modeling techniques for shape memory alloys // *Int. J. Plasticity*, 2016. vol. 76. pp. 244–284. doi: 10.1016/j.ijplas.2015.08.006.
17. Fabrizio M., Pecoraro M., Tibullo V. A shape memory alloy model by a second order phase transition // *Mech. Res. Com.*, 2016. vol. 74. pp. 20–26. doi: 10.1016/j.mechrescom.2016.03.005.
18. Сараев Л. А. *Математическое моделирование упругопластических свойств многокомпонентных композиционных материалов.* Самара: СНЦ РАН, 2017. 222 с.
19. Ильина Е. А., Сараев Л. А. Влияние кинетики фазовых превращений на сверхупругое упрочнение нестабильного материала // *Современные материалы, техника и технологии*, 2017. № 7(15). С. 28–38.
20. Christensen R. M. *Mechanics of composite materials.* New York: Wiley & Sons Inc., 1979. xiv+348 pp.
21. Шермергор Т. Д. *Теория упругости микронеоднородных сред.* М.: Наука, 1979. 399 с.
22. Сараев А. Л., Сараев Л. А. Макроскопические модули упругости многокомпонентных композитов с изменяемой микроструктурой // *Математика, экономика и управление*, 2015. Т. 1, № 3. С. 35–40.
23. Steurer W. Crystal Structures of Metallic Elements and Compounds / *Physical Metallurgy.* vol. 1; eds. David E. Laughlin, Kazuhiro Hono. Elsevier Inc., 2014. pp. 1–101. doi: 10.1016/B978-0-444-53770-6.00001-0.
24. Murakami Y. Lattice softening, phase stability and elastic anomaly of the β-Au-Cu-Zn alloys // *J. Phys. Soc. Jpn.*, 1972. vol. 33, no. 5. pp. 1350–1361. doi: 10.1143/JPSJ.33.1350.
25. Nakanishi N., Mori T., Miura S., Murakami Y., Kachi S. Pseudoelasticity in Au-Cd thermoelastic martensite // *Philosophical Magazine*, 1973. vol. 28, no. 2. pp. 277–282. doi: 10.1080/14786437308217452.

Vestn. Samar. Gos. Tekhn. Univ., Ser. Fiz.-Mat. Nauki
[J. Samara State Tech. Univ., Ser. Phys. Math. Sci.], 2018, vol. 22, no. 3, pp. 407–429
ISSN: 2310-7081 (online), 1991-8615 (print) http://doi.org/10.14498/vsgtu1626

MSC: 74A60, 74A40, 74A05

Modeling of phase transformations and superelastic hardening of unstable materials

E. A. Ilyina, L. A. Saraev

Samara National Research University,
34, Moskovskoye shosse, Samara, 443086, Russian Federation.

Abstract

The article presents models of superelastic hardening of materials with unstable phase structure at a constant temperature. The kinetic equation of the process of formation and growth of spherical nuclei of a new phase is formulated depending on the level of development of inelastic structural deformations, according to which the new phase first represents separate inclusions from embryos, developing it forms the structures of the matrix mixture in the form of interpenetrating skeletons, and finally the new phase is transformed in a matrix with separate inclusions from the material of the remains of the old phase. The influence of structural deformations on the features of phase transformations and nonlinear hardening of inhomogeneous unstable materials with different degree of connectivity of the constituent phases is studied. Various variants of the microstructure material formed in the conditions of the phase transition in the form of separate inclusions and in the form of interpenetrating components are considered. New macroscopic determining relationships for unstable microinhomogeneous materials are established and their effective elastic moduli are calculated. Macroscopic conditions of direct and inverse phase transitions are obtained, their effective limits and hardening coefficients are calculated. It is shown that the values of the macroscopic elasticity moduli of the obtained models lie inside the fork of the lower and upper Hashin-Shtrikman boundaries. Numerical analysis of the developed models has shown good agreement with known experimental data.

Keywords: phases, macroscopic properties, elastic moduli, statistical homogeneity, structure, structural deformations, phase transition, ergodicity, effective relations.

Received: 13th May, 2018 / Revised: 21st August, 2018 /
Accepted: 3rd September, 2018 / First online: 9th September, 2018

Research Article

Please cite this article in press as:
Ilyina E. A., Saraev L. A. Modeling of phase transformations and superelastic hardening of unstable materials, *Vestn. Samar. Gos. Tekhn. Univ., Ser. Fiz.-Mat. Nauki* [J. Samara State Tech. Univ., Ser. Phys. Math. Sci.], 2018, vol. 22, no. 3, pp. 407–429. doi: 10.14498/vsgtu1626 (In Russian).

Authors' Details:

Elena A. Ilyina http://orcid.org/0000-0002-2590-6138
Cand. Phys. & Math. Sci.; Associate Professor; Dept. of Mathematics and Business Informatics; e-mail: elenaalex.ilyina@yandex.ru

Leonid A. Saraev http://orcid.org/0000-0003-3625-5921
Dr. Phys. & Math. Sci., Professor; Head of Dept.; Dept. of Mathematics and Business Informatics; e-mail: saraev_leo@mail.ru

Competing interests. We have no competing interests.

Authors' contributions and responsibilities. Each author has participated in the article concept development and in the manuscript writing. The authors are absolutely responsible for submitting the final manuscript in print. Each author has approved the final version of manuscript.

Funding. This research received no specific grant from any funding agency in the public, commercial, or not-for-profit sectors.

References

1. Isupova I. L., Trusov P. V. Mathematical modeling of phase transformations in steel under thermomechanical loading, *PNRPU Mechanics Bulletin*, 2013, no. 3, pp. 126–156 (In Russian).
2. Mishustin I. V., Movchan A. A. Modeling of phase and structure transformations occurring in shape memory alloys under nonmonotonically varying stresses, *Mech. Solids*, 2014, vol. 49, no. 1, pp. 27–39. doi: 10.3103/S002565441401004X.
3. Mishustin I. V., Movchan A. A. Analog of the plastic flow theory for describing martensitic inelastic strains in shape memory alloys, *Mech. Solids*, 2015, vol. 50, no. 2, pp. 176–190. doi: 10.3103/S0025654415020077.
4. Kazarina S. A., Movchan A. A., Sil'chenko A. L. Experimental investigation the interaction between phase and structure deformations in shape memory alloys, *Mekhanika kompozitsionnykh materialov i konstruktsii* [Composite Mechanics and Design], 2016, vol. 22, no. 1, pp. 85–98 (In Russian).
5. Movchan A. A., Sil'chenko A. L., Kazarina S. A. Experimental study and theoretical simulation of the cross hardening effect in shape memory alloys, *Russ. Metall.*, 2017, vol. 2017, no. 10, pp. 779–784. doi: 10.1134/S0036029517100147.
6. Trusov P. V., Volegov P. S., Isupova I. L., Kondrat'ev N. S., Makarevich E. S., Niashina N. D., Ostanina T. V., Sharifullina E. R. Multilevel model for the description of solid-state phase transitions in multicomponent alloys, *Vestnik Permskogo nauchnogo tsentra URO RAN*, 2016, no. 4, pp. 83–90 (In Russian).
7. Tikhomirova K. A. Isothermal deformation of shape memory alloy in different temperature ranges. Uniaxial case, *Mekhanika kompozitsionnykh materialov i konstruktsii* [Composite Mechanics and Design], 2017, vol. 23, no. 2, pp. 263–282 (In Russian).
8. Tikhomirova K. A. Phenomenological modeling of phase and structural deformations in shape memory alloys. One-dimensional case, *Computational Mechanics of Continuous Media*, 2018, vol. 11, no. 1, pp. 36–50 (In Russian). doi: 10.7242/1999-6691/2018.11.1.4.
9. Tikhomirova K. A. Experimental and theoretical study of the relation between phase and structural deformations in shape memory alloys, *PNRPU Mechanics Bulletin*, 2018, no. 1, pp. 40–57 (In Russian). doi: 10.15593/perm.mech/2018.1.04.
10. Mutter D., Nielaba P. Simulation of the shape memory effect in a NiTi nano model system, *J. All. Compounds*, 2013, vol. 577, pp. S83–S87, arXiv: 1202.1078 [cond-mat.mtrl-sci]. doi: 10.1016/j.jallcom.2012.01.095.
11. Auricchio F., Bonetti E., Scalet G., Ubertini F. Theoretical and numerical modeling of shape memory alloys accounting for multiple phase transformations and martensite reorientation, *Int. J. Plasticity*, 2014, vol. 59, pp. 30–54. doi: 10.1016/j.ijplas.2014.03.008.
12. Yu C., Kang G., Kan Q. Crystal plasticity based constitutive model of NiTi shape memory alloy considering different mechanisms of inelastic deformation, *Int. J. Plasticity*, 2014, vol. 54, pp. 132–162. doi: 10.1016/j.ijplas.2013.08.012.
13. Elibol C., Wagner M. F.-X. Investigation of the stress-induced martensitic transformation in pseudoelastic NiTi under uniaxial tension, compression and compression–shear, *Mat. Sci. Eng. A*, 2015, vol. 621, pp. 76–81. doi: 10.1016/j.msea.2014.10.054.
14. Lobo P. S., Almeida J., Guerreiro L. Shape memory alloys behaviour: A review, *Procedia Engineering*, 2015, vol. 114, pp. 776–783. doi: 10.1016/j.proeng.2015.08.025.

15. Yoo Y.-I., Kim Y.-J., Shin D.-K., Lee J.-J. Development of martensite transformation kinetics of NiTi shape memory alloys under compression, *Int. J. Sol. Struct.*, 2015, vol. 64–65, pp. 51–61. doi: 10.1016/j.ijsolstr.2015.03.013.
16. Cisse C., Zaki W., Zineb T. B. A review of constitutive models and modeling techniques for shape memory alloys, *Int. J. Plasticity*, 2016, vol. 76, pp. 244–284. doi: 10.1016/j.ijplas.2015.08.006.
17. Fabrizio M., Pecoraro M., Tibullo V. A shape memory alloy model by a second order phase transition, *Mech. Res. Com.*, 2016, vol. 74, pp. 20–26. doi: 10.1016/j.mechrescom.2016.03.005.
18. Saraev L. A. *Matematicheskoe modelirovanie uprugoplasticheskikh svoistv mnogokomponentnykh kompozitsionnykh materialov* [Mathematical modeling of elastoplastic properties of multicomponent composite materials]. Samara, Samara Science Center of RAS, 2017, 222 pp. (In Russian)
19. Ilyina E. A., Saraev L. A. The impact of the kinetics of phase transformations on the superelastic hardening of an unstable material, *Sovremennye materialy, tekhnika i tekhnologii*, 2017, no. 7(15), pp. 28–38 (In Russian).
20. Christensen R. M. *Mechanics of composite materials.* New York, Wiley & Sons Inc., 1979, xiv+348 pp.
21. Shermergor T. D. *Teoriia uprugosti mikroneodnorodnykh sred* [The theory of elasticity of microinhomogeneous media]. Moscow, Nauka, 1979, 399 pp. (In Russian)
22. Saraev A. L., Saraev L. A. Macroscopic elastic moduli of multicomponent composites with variable microstructure, *Mathematics, Economics and Management*, 2015, vol. 1, no. 3, pp. 35–40 (In Russian).
23. Steurer W. Crystal Structures of Metallic Elements and Compounds, In: *Physical Metallurgy*, vol. 1; eds. David E. Laughlin, Kazuhiro Hono. Elsevier Inc., 2014, pp. 1–101. doi: 10.1016/B978-0-444-53770-6.00001-0.
24. Murakami Y. Lattice softening, phase stability and elastic anomaly of the β-Au-Cu-Zn alloys, *J. Phys. Soc. Jpn.*, 1972, vol. 33, no. 5, pp. 1350–1361. doi: 10.1143/JPSJ.33.1350.
25. Nakanishi N., Mori T., Miura S., Murakami Y., Kachi S. Pseudoelasticity in Au-Cd thermoelastic martensite, *Philosophical Magazine*, 1973, vol. 28, no. 2, pp. 277–282. doi: 10.1080/14786437308217452.