Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки. 2024. Т. 28, № 4. С. 721–739
ISSN: 2310-7081 (online), 1991-8615 (print) https://doi.org/10.14498/vsgtu2129
EDN: NOXAGA

УДК 539.374

Стохастические сверхупругие свойства материалов с фазовыми превращениями

Л. А. Сараев

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

Аннотация

Проведено исследование влияния стохастических изотермических фазовых превращений в нестабильном материале на его сверхупругое упрочнение.

Получено стохастическое дифференциальное уравнение, описывающее динамику образования и роста объема новой фазы, а также ее взаимодействие с исходной фазой в зависимости от уровня необратимых структурных деформаций.

Установлены макроскопические определяющие соотношения для нестабильного материала, учитывающие стохастическую природу фазовых превращений и зависимость от структурных деформаций. На основе этих соотношений вычислены эффективные модули упругости материала.

Сформулированы стохастические дифференциальные уравнения для прямых и обратных фазовых переходов.

Результаты численного моделирования демонстрируют высокую согласованность с экспериментальными данными, подтверждая адекватность предложенной модели.

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

Получение: 5 ноября 2024 г. / Исправление: 16 декабря 2024 г. / Принятие: 20 декабря 2024 г. / Публикация онлайн: 25 декабря 2024 г.

Механика деформируемого твердого тела
Научная статья

Образец для цитирования
Сараев Л. А. Стохастические сверхупругие свойства материалов с фазовыми превращениями // *Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки*, 2024. Т. 28, № 4. С. 721–739. EDN: NOXAGA. DOI: 10.14498/vsgtu2129.

Сведения об авторе
Леонид Александрович Сараев https://orcid.org/0000-0003-3625-5921
доктор физико-математических наук, профессор; профессор; кафедра математики и бизнес-информатики; e-mail: saraev_leo@mail.ru

Введение. Материалы, обладающие эффектом памяти формы и сверхупругости, широко применяются в современном машиностроении, теплоэнергетическом комплексе, медицине и других отраслях экономики.

Теоретическое прогнозирование физико-механических свойств таких материалов представляет собой актуальное направление современной механики деформируемого твердого тела.

Нелинейное упрочнение при нагрузке и нелинейное разупрочнение при разгрузке изначально упругих формозапоминающих металлов и сплавов объясняется внутренними фазовыми превращениями, в результате которых в сплошной среде образуется и развивается стохастическая фазовая структура.

Адекватная оценка механических свойств таких материалов, их сверхупругого поведения и эффектов памяти формы требует разработки стохастических структурных математических моделей превращений фазовых структур.

Существует ряд подходов к решению подобных задач. Например, в рамках феноменологического подхода разработаны математические модели, в которых механическое поведение материалов с памятью формы описывается реологическими соотношениями, а непрерывное изменение структуры среды в условиях фазовых превращений задается набором параметров определяющих соотношений, определяемых экспериментально [1–5].

В рамках более сложного структурно-феноменологического подхода исходными данными являются физико-механические константы и геометрические особенности взаимного расположения фаз в пространстве. В этом случае макроскопические определяющие уравнения для сред с памятью формы устанавливаются методами механики композиционных материалов [6–17].

В настоящем исследовании предполагается, что под воздействием внешних нагрузок из-за трансформации кристаллической и доменной структуры материала возникают необратимые структурные деформации. В объеме старой фазы образуются и развиваются объемы компонентов новой фазы, причем в процессе фазовых превращений не только изменяются объемы фаз, но и случайным образом трансформируется связность их компонентов. Уровень структурных деформаций при этом ограничен предельными сдвигами двойниковых доменов.

Целью данной работы является разработка новых стохастических структурно-феноменологических моделей сверхупругого упрочнения материалов с нестабильной фазовой структурой.

1. Постановка задачи. Рассмотрим однородный упругий материал, в котором под воздействием внешних напряжений образуются зародыши новой фазы сферической формы, сопровождающиеся фазовым переходом 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 старой фазы новой под воздействием внешних нагрузок, вызванное перестройкой кристаллической и доменной структуры материала

$$V_q \to V,$$
$$V_p \to V - V_q \to 0,$$

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

$$0 \leqslant \omega_{ij} \leqslant \Omega_{ij}.$$

Здесь Ω_{ij} — максимальный уровень структурных деформаций, удовлетворяющий условию несжимаемости $\omega_{ss}(\mathbf{r}) = 0$.

Закон Гука для компонент рассматриваемой среды имеет вид

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

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

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

$$\begin{cases} (s_{ij} - 2n_q\omega_{ij})(s_{ij} - 2n_q\omega_{ij}) = s_q^2, & V_q \to V, \\ (s_{ij} - 2n_p\omega_{ij})(s_{ij} - 2n_p\omega_{ij}) = s_p^2, & V_p \to V. \end{cases} \tag{2}$$

Здесь $s_{ij} = \sigma_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\sigma_{ss}$ — девиаторные компоненты тензора напряжений; s_p, s_k — пределы прямого и обратного фазовых переходов; n_p, n_k — коэффициенты линейного упрочнения двойниковых доменов соответственно. Величины s_k и n_k 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_q и n_p описывают линейное сопротивление деформациям сдвига двойниковых доменов и являются «вторыми модулями упругости» фаз за пределами прямого и обратного фазовых переходов.

Особенности геометрии внутренней структуры нестабильного материала могут быть описаны случайными индикаторными функциями координат $\varkappa_p(\mathbf{r})$ и $\varkappa_q(\mathbf{r})$, каждая из которых принимает значение 1 внутри объемов V_p, V_q и 0 вне этих областей. Очевидно, выполняется тождество $\varkappa_p(\mathbf{r}) + \varkappa_q(\mathbf{r}) \equiv 1$.

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, $K_k = \frac{2}{3}\mu_k + \lambda_k$, $k \in \{p, q\}$ — объемные модули упругости фаз, $\mathbf{r} = (x_1, x_2, x_3)$ — 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 позволяет 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 [18–20]:

$$\langle f\rangle = \frac{1}{V}\int_V f(\mathbf{r})d\mathbf{r}, \quad \langle f\rangle_p = \frac{1}{V_p}\int_{V_p} f(\mathbf{r})d\mathbf{r}, \quad \langle f\rangle_q = \frac{1}{V_q}\int_{V_q} f(\mathbf{r})d\mathbf{r};$$

здесь 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):

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

Здесь $c_p = V_p/V$, $c_q = V_q/V$ — объемные содержания 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:

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

2. Эффективные модули упругости нестабильной микронеоднородной среды. Введем модули упругости тела сравнения μ и K, определяющие тип связности составляющих компонентов микронеоднородной среды. В самом общем случае величины μ и K являются функциями объемных содержаний компонентов и могут быть представлены соотношениями [19]

$$\mu = v_p(c_p)\mu_p + v_q(c_q)\mu_q, \quad K = v_p(c_p)K_p + v_q(c_q)K_q. \tag{8}$$

Здесь величины v_p и v_q — монотонно возрастающие функции, описывающие связность составляющих компонентов композитов и удовлетворяющие условиям

$$0 \leqslant v_p(c_p) \leqslant 1, \quad v_p(0) = 0, \quad v_p(1) = 1,$$
$$0 \leqslant v_q(c_q) \leqslant 1, \quad v_q(0) = 0, \quad v_q(1) = 1,$$
$$v_p(c_p) + v_q(c_q) \equiv 1.$$

Исключая из системы уравнений (3), (5) и (6) компоненты тензоров напряжений и деформаций, получаем систему уравнений равновесия микронеоднородной среды в перемещениях [18]:

$$\mu u'_{i,ss}(\mathbf{r}) + (\mu+\lambda)u'_{s,si}(\mathbf{r}) - \tau'_{is,s}(\mathbf{r}) = 0. \tag{9}$$

Здесь

$$\begin{aligned} &\tau_{ij} = t_{ij} + \tfrac{1}{3}\delta_{ij}\tau_{ss},\\ &t_{ij} = -2\mu\big((m_p-1)\varkappa_p + (m_q-1)\varkappa_q\big)e_{ij} + 2\mu_q\varkappa_q\omega_{ij},\\ &\tau_{ss} = -3K\big((k_p-1)\varkappa_p + (k_q-1)\varkappa_q\big)\varepsilon_{ss}; \end{aligned} \tag{10}$$

штрихами обозначены $Z' = Z - \langle Z\rangle$ — флуктуации величин в полном объеме V; $m_p = \mu_p/\mu$, $m_q = \mu_q/\mu$, $k_p = K_p/K$, $k_q = K_q/K$.

С помощью тензора Грина

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

систему уравнений (9), (10) с граничными условиями (7) заменим системой интегральных уравнений [18–20]:

$$\varepsilon'_{ij}(\mathbf{r}) = \int_V \mathbf{G}_{ik,lj}(\mathbf{r}-\mathbf{r}_1)\tau'_{kl}(\mathbf{r}_1)d\mathbf{r}_1. \tag{11}$$

Величины $\langle\varepsilon_{ij}\rangle_q$ находятся из известного соотношения [20]

$$\langle\varepsilon_{ij}\rangle_q = \langle\varepsilon_{ij}\rangle + c_q^{-1}\langle\varkappa'\varepsilon'_{ij}\rangle. \tag{12}$$

Подстановка уравнений (11) в соотношения (12) и использование свойства изотропности индикаторных функций $\varkappa_r(\mathbf{r})$ дает

$$\begin{aligned} &\langle e_{ij}\rangle_q = \big(1+\alpha(m_p-1)\big)\xi\langle e_{ij}\rangle + \alpha m_q c_p\xi\langle\omega_{ij}\rangle_q,\\ &\langle\varepsilon_{ss}\rangle_q = \big(1+\gamma(k_p-1)\big)\eta\langle\varepsilon_{ss}\rangle. \end{aligned} \tag{13}$$

Здесь

$$\xi = \frac{1}{1+\alpha\big((m_p-1)+c_p(m_q-m_p)\big)}, \quad \eta = \frac{1}{1+\gamma\big((k_p-1)+c_p(k_q-k_p)\big)},$$

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

Подставляя формулы (13) в соотношения (4), находим макроскопический закон Гука:

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

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

$$\langle s_{ij}\rangle = 2\mu^*(\langle e_{ij}\rangle - \langle e^*_{ij}\rangle), \quad \langle\sigma_{ss}\rangle = 3K^*\langle\varepsilon_{ss}\rangle, \quad \langle e^*_{ij}\rangle = \frac{\mu^\omega}{\mu^*}\langle\omega_{ij}\rangle. \tag{14}$$

Здесь

$$
\begin{aligned}
&\mu^* = \mu\big(m_p + c_q(m_q - m_p)(1 + \alpha(m_p - 1))\xi\big),\\
&K^* = K\big(k_p + c_q(k_q - k_p)(1 + \gamma(k_p - 1))\eta\big),\\
&\mu^\omega = \mu_q\big(1 - \alpha c_p(m_q - m_p)\xi\big).
\end{aligned} \tag{15}
$$

Процесс фазовых превращений в нестабильном материале описывается с помощью соотношений (8) и величины v_q. Его можно условно разделить на три этапа.

На первом этапе при малых объемных содержаниях новой фазы нестабильного материала возникающие включения-зародыши практически не влияют друг на друга. Связность между новой и старой фазами на этом этапе минимальна, а взаимодействием между зародышами можно пренебречь. В этом случае функция $v_q(c_q)$ принимает значения, близкие к нулю, а основной вклад в несущую способность материала вносит старая фаза, содержащая хаотически распределенные включения-зародыши новой фазы.

На втором этапе с ростом объемной концентрации новой фазы c_q и увеличением значений функции $v_q(c_q)$ взаимодействие между включениями-зародышами усиливается. Они образуют группы и структуры, формирующие в конечном итоге взаимопроникающие каркасы фазовой матричной смеси.

На третьем этапе при значениях c_q и $v_q(c_q)$, близких к единице, функциональные роли старой и новой фаз меняются. Новая фаза V_q становится связующей матрицей, а старая фаза V_p сохраняется в виде изолированных включений, взаимодействием которых можно пренебречь.

Таким образом, положительное приращение функции связности $\Delta v_q > 0$ будет пропорционально относительному приращению старой фазы:

$$
\Delta v_q \sim -\frac{\Delta V_p}{V_p} = \frac{\Delta V_q}{V_p} = \frac{\Delta(c_q V)}{c_p V} = \frac{\Delta c_q}{1 - c_q}. \tag{16}
$$

Приращение функции связности $\Delta v_q = v_q(c_q + \Delta c_q) - v_q(c_q)$ на малом отрезке Δc_q можно представить в виде двух слагаемых:

$$
\Delta v_q = \Delta v_q^a + \Delta v_q^b, \tag{17}
$$

где Δv_q^a — частичное приращение функции связности за счет слабого взаимодействия отдельных частиц, а Δv_q^b — приращение, обусловленное существенным взаимодействием частиц, образующих каркасные структуры.

С помощью формулы (16) величины Δv_q^a и Δv_q^b можно представить в виде

$$
\begin{cases}
\Delta v_q^a = a(1 - v_q)\dfrac{\Delta c_q}{1 - c_q},\\
\Delta v_q^b = b v_q(1 - v_q)\dfrac{\Delta c_q}{1 - c_q}.
\end{cases} \tag{18}
$$

Здесь a — коэффициент, описывающий взаимодействие включений-зародышей на начальном этапе развития новой фазы; b — коэффициент, характеризующий последующее интенсивное взаимодействие зародышей и формирование из них матричных смесей новой фазы. Множитель $(1 - v_q)$ отражает процесс насыщения, при котором образование новой фазы замедляется. На этом этапе старая и новая фазы меняются функциональными ролями: новая фаза V_q формирует связующую матрицу, а старая фаза V_p сохраняется в виде изолированных включений, взаимодействием которых можно пренебречь.

Подставляя формулы (18) в соотношение (17), вычислим приращение функции связности Δv_q:

$$\Delta v_q = \frac{(a+bv_q)(1-v_q)}{1-c_q}\Delta c_q. \tag{19}$$

Переходя к пределу в соотношении (19) при $\Delta c_q \to 0$, получаем дифференциальное уравнение, описывающее процесс вытеснения старой фазы новой [21]:

$$\frac{dv_q}{dc_q} = \frac{(a+bv_q)(1-v_q)}{1-c_q}. \tag{20}$$

Начальное условие для уравнения (20) задается выражением

$$v_q\big|_{c_q=0} = 0. \tag{21}$$

Решение задачи Коши (20), (21) имеет вид

$$v_q = a\frac{1-(1-c_q)^{a+b}}{a+b(1-c_q)^{a+b}}. \tag{22}$$

На рис. 1 представлен график функции связности $v_q(c_q)$, рассчитанной по формуле (22) при $a = 0.2$ и $b = 3.33$.

На рис. 2 показана зависимость эффективного модуля упругости сдвига (сплошная линия), полученная по формулам (15) и (22) при $\mu_p = 1$, $\nu_p = 0.29$, $\mu_q = 20$, $\nu_q = 0.3$. Результаты расположены внутри вилки Хашина—Штрикмана, где верхняя и нижняя границы обозначены штриховыми линиями.

Анализ зависимости эффективного модуля упругости сдвига показывает:

– при малых значениях объемной концентрации новой фазы c_q эффективный модуль упругости близок к нижней границе Хашина—Штрикмана;
– при $c_q \to 1$ значения эффективного модуля асимптотически приближаются к верхней границе.

3. Эффективные параметры упрочнения сверхупругого деформирования нестабильного материала. Определяющие макроскопические уравнения упрочнения и разупрочнения нестабильного материала для прямого и обратного фазовых переходов определяются посредством усреднения локальных пороговых условий (2) по объему новой фазы V_q:

$$\begin{aligned} \big(\langle s_{ij}\rangle_q - 2n_p\langle\omega_{ij}\rangle_q\big)\big(\langle s_{ij}\rangle_q - 2n_p\langle\omega_{ij}\rangle_q\big) &= s_p^2, \\ \big(\langle s_{ij}\rangle_q - 2n_q\langle\omega_{ij}\rangle_q\big)\big(\langle s_{ij}\rangle_q - 2n_q\langle\omega_{ij}\rangle_q\big) &= s_q^2. \end{aligned} \tag{23}$$

Уравнениям поверхностей (23) в шестимерном пространстве напряжений соответствует ассоциированный закон деформирования:

$$\begin{aligned} \langle s_{ij}\rangle_q &= s_p\frac{\langle\dot\omega_{ij}\rangle}{\sqrt{\langle\dot\omega_{kl}\rangle\langle\dot\omega_{kl}\rangle}} + 2n_p\langle\omega_{ij}\rangle_q, \\ \langle s_{ij}\rangle_q &= s_q\frac{\langle\dot\omega_{ij}\rangle}{\sqrt{\langle\dot\omega_{kl}\rangle\langle\dot\omega_{kl}\rangle}} + 2n_q\langle\omega_{ij}\rangle_q. \end{aligned} \tag{24}$$

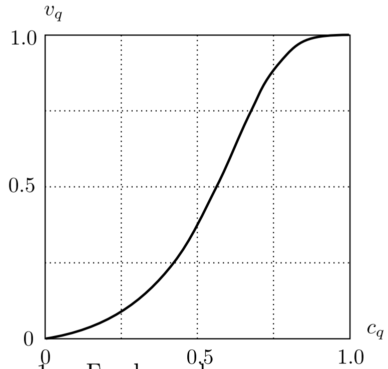

Рис. 1. График функции связности $v_q(c_q)$, построенный по формуле (22) при $a = 0.2$ и $b = 3.33$

[Figure 1. Plot of the connectivity function $v_q(c_q)$ calculated using formula (22) with $a = 0.2$ and $b = 3.33$]

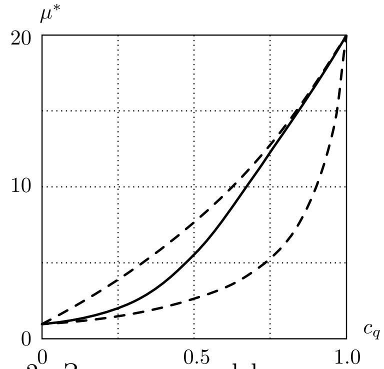

Рис. 2. Зависимость эффективного модуля упругости сдвига (сплошная линия), полученная по формулам (15) и (22) при $\mu_p = 1$, $\nu_p = 0.29$, $\mu_q = 20$, $\nu_q = 0.3$; штриховые линии — вилка Хашина—Штрикмана

[Figure 2. Dependence of the effective shear modulus (solid line) calculated using equations (15) and (22) with $\mu_p = 1$, $\nu_p = 0.29$, $\mu_q = 20$, $\nu_q = 0.3$; dashed lines indicate the Hashin–Shtrikman bounds]

Исключение девиаторных компонентов тензора напряжений $\langle s_{ij}\rangle_q$ из соотношений (24) с помощью локального закона Гука (1) приводит к уравнениям

$$\begin{aligned} 2\mu_q\langle e_{ij}\rangle_q - 2(\mu_q + n_p)\ \langle\omega_{ij}\rangle_q = s_p\theta_{ij}, \\ 2\mu_q\langle e_{ij}\rangle_q - 2(\mu_q + n_q)\ \langle\omega_{ij}\rangle_q = s_q\theta_{ij}, \end{aligned} \tag{25}$$

где

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

а точка обозначает производную по времени компонентов тензора структурных деформаций ω_{ij}.

Подстановка уравнений (13) в (25) приводит к соотношениям

$$\begin{aligned} \big(1 + \alpha(m_p - 1)\big)\xi\langle e_{ij}\rangle + \left(\alpha m_q c_p\xi - \left(1 + \frac{n_p}{\mu_q}\right)\right)\langle\omega_{ij}\rangle_q = \frac{s_p}{2\mu_q}\langle\theta_{ij}\rangle, \\ \big(1 + \alpha(m_p - 1)\big)\xi\langle e_{ij}\rangle + \left(\alpha m_q c_p\xi - \left(1 + \frac{n_q}{\mu_q}\right)\right)\langle\omega_{ij}\rangle_q = \frac{s_q}{2\mu_q}\langle\theta_{ij}\rangle. \end{aligned}$$

Исключение макродеформаций $\langle e_{ij}\rangle$ из данных соотношений и макроскопического закона Гука (14) дает

$$\big(1 + \alpha(m_p - 1)\big)\xi\left(\frac{\langle s_{ij}\rangle}{2\mu^*} + \langle e^*_{ij}\rangle\right) + \left(\alpha m_q c_p\xi - \left(1 + \frac{n_p}{\mu_q}\right)\right)\frac{\mu^*}{c_q\mu^\omega}\langle e^*_{ij}\rangle = \frac{s_p}{2\mu_q}\langle\theta_{ij}\rangle,$$

$$\big(1 + \alpha(m_p - 1)\big)\xi\left(\frac{\langle s_{ij}\rangle}{2\mu^*} + \langle e^*_{ij}\rangle\right) + \left(\alpha m_q c_p\xi - \left(1 + \frac{n_q}{\mu_q}\right)\right)\frac{\mu^*}{c_q\mu^\omega}\langle e^*_{ij}\rangle = \frac{s_q}{2\mu_q}\langle\theta_{ij}\rangle,$$

или

$$\begin{aligned}
&\big(1+\alpha(m_p-1)\big)\xi\langle s_{ij}\rangle + 2\mu^*\Big(\big(1+\alpha\,(m_p-1)\big)\xi + \\
&\qquad + \Big(\alpha m_q c_p \xi - \Big(1+\frac{n_p}{\mu_q}\Big)\Big)\frac{\mu^*}{c_q\mu^\omega}\langle e^*_{ij}\rangle\Big) = s_p\frac{\mu^*}{\mu_q}\theta_{ij}, \\
&\big(1+\alpha(m_p-1)\big)\xi\langle s_{ij}\rangle + 2\mu^*\Big(\big(1+\alpha\,(m_p-1)\big)\xi + \\
&\qquad + \Big(\alpha m_q c_p \xi - \Big(1+\frac{n_q}{\mu_q}\Big)\Big)\frac{\mu^*}{c_q\mu^\omega}\langle e^*_{ij}\rangle\Big) = s_q\frac{\mu^*}{\mu_q}\theta_{ij}.
\end{aligned} \tag{26}$$

Соотношения (26) представляют собой макроскопический закон деформирования:

$$\langle s_{ij}\rangle = s^*_p\theta_{ij} + 2n^*_p e^*_{ij}, \quad \langle s_{ij}\rangle = s^*_q\theta_{ij} + 2n^*_q e^*_{ij}. \tag{27}$$

Поверхность кинематического упрочнения, ассоциированная с законом (27), задается уравнениями

$$\begin{aligned}
(\langle s_{ij}\rangle - 2n^*_p e^*_{ij})(\langle s_{ij}\rangle - 2n^*_p e^*_{ij}) = s^{*2}_p, \\
(\langle s_{ij}\rangle - 2n^*_q e^*_{ij})(\langle s_{ij}\rangle - 2n^*_q e^*_{ij}) = s^{*2}_q,
\end{aligned} \tag{28}$$

где

$$s^*_p = s_p\frac{\mu^*}{\mu_q}\frac{1}{\big(1+\alpha(m_p-1)\big)\xi}, \quad s^*_q = s_q\frac{\mu^*}{\mu_q}\frac{1}{\big(1+\alpha(m_p-1)\big)\xi} \tag{29}$$

— эффективные пределы прямого и обратного фазовых переходов, а

$$\begin{aligned}
n^*_p = \mu^*\Big(\frac{s^*_p}{c_q s_p}\Big(\frac{1-\alpha(1-c_q m_p)}{1+\alpha(m_p-1)} + \frac{n_p}{\mu^\omega}\Big) - 1\Big), \\
n^*_q = \mu^*\Big(\frac{s^*_q}{c_q s_q}\Big(\frac{1-\alpha(1-c_q m_p)}{1+\alpha(m_p-1)} + \frac{n_q}{\mu^\omega}\Big) - 1\Big)
\end{aligned} \tag{30}$$

— эффективные коэффициенты упрочнения, характеризующие скорость перемещения поверхности (28) в шестимерном пространстве макронапряжений.

Для малых объемных концентраций новой фазы c_q формулы (29), (30) принимают вид

$$\begin{aligned}
s^*_p &= s_p\Big(\frac{1}{m} + (\alpha_p c_p + c_q)\Big(1-\frac{1}{m}\Big)\Big), \\
n^*_p &= \mu^*\Big(\frac{s^*_p}{c_q s_p}\Big((1-\alpha_p c_p) + \frac{n_p}{\mu_q}(1+\alpha_p c_p(m-1))\Big) - 1\Big); \\
s^*_q &= s_q\Big(\frac{1}{m} + (\alpha_p c_p + c_q)\Big(1-\frac{1}{m}\Big)\Big), \\
n^*_q &= \mu^*\Big(\frac{s^*_q}{c_q s_q}\Big((1-\alpha_p c_p) + \frac{n_q}{\mu_q}(1+\alpha_p c_p(m-1))\Big) - 1\Big).
\end{aligned} \tag{31}$$

При $n_q = n_p = 0$ формулы (31) совпадают с выражениями, полученными в работе [19].

Определяющие уравнения (27) с эффективными параметрами (29) и (30) представляют собой макроскопический закон нелинейного упрочнения рассматриваемого нестабильного материала.

Для практического применения данного закона необходимо установить связь между средними структурными деформациями $\langle\omega_{ij}\rangle_q$ и объемным содержанием 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. Выделение таких двух последовательных этапов в процессе фазового превращения является условным, поскольку различные элементы обоих этапов могут наблюдаться одновременно, а на разных стадиях развития уровни структурных деформаций могут демонстрировать преобладание одного из них над другим [22].

Как правило, при повторных нагружениях образцов, изготовленных из нестабильных материалов, процесс фазового превращения в них каждый раз протекает несколько иначе. Это позволяет сделать вывод о том, что характер формирования внутренней структуры материала является случайным. Поэтому функцию объемного содержания новой фазы c_q целесообразно считать стохастической величиной.

Для прогнозирования изменения величины объемного содержания c_q от уровня средних структурных деформаций $\langle\omega_{ij}\rangle_q$ целесообразно ввести безразмерную величину

$$\omega = \frac{\Omega_q}{\Omega} = \sqrt{\frac{\langle\omega_{ij}\rangle_q\langle\omega_{ij}\rangle_q}{\Omega_{ij}\Omega_{ij}}},$$

где $\Omega_q = \sqrt{\langle\omega_{ij}\rangle_q\langle\omega_{ij}\rangle_q}$, $\Omega = \sqrt{\Omega_{ij}\Omega_{ij}}$.

Очевидно, что изменение величины объемного содержания c_q должно соответствовать изменениям уровня средних структурных деформаций $\langle\omega_{ij}\rangle_q$. Чем ближе будут значения величин $\langle\omega_{ij}\rangle_q$ к своим максимальным значениям ($\langle\omega_{ij}\rangle_q \to \Omega_{ij}$, $\omega \to 1$), тем ближе будут значения величины объемного содержания c_q к единице ($c_q \to 1$). Поэтому будем предполагать, что положительное приращение величины объемного содержания $\Delta c_q > 0$ будет пропорционально относительному приращению уровня структурных деформаций:

$$\Delta c_q \sim -\frac{\Delta(\Omega-\Omega_q)}{\Omega-\Omega_q} = \frac{\Delta\Omega_q}{\Omega-\Omega_q} = \frac{\Delta\omega}{1-\omega}.$$

Приращение объемного содержания $\Delta c_q(\omega) = c_q(\omega+\Delta\omega) - c_q(\omega)$ на некотором малом отрезке $\Delta\omega$ можно представить в виде суммы двух слагаемых:

$$\Delta c_q(\omega) = \Delta c_q^{\omega}(\omega) + \Delta c_q^{w}(\omega).$$

Здесь $\Delta c_q^{\omega}(\omega)$ — частичное приращение величины объемного содержания c_q на отрезке $\Delta\omega$ за счет развития структурных деформаций; $\Delta c_q^{w}(\omega)$ — частичное приращение величины объемного содержания c_q на отрезке $\Delta\omega$ за счет случайного характера образования областей фазового превращения.

Будем предполагать, что скорость роста объемного содержания новой фазы пропорциональна объемному содержанию старой фазы: $c_p(\omega) = 1 - c_q(\omega)$.

Учитывая при этом, что стохастический процесс фазовых превращений в нестабильном материале в начале (при $\omega \to 0$) и конце (при $\omega \to 1$) становится практически детерминированным, величины Δc_q^ω и Δc_q^w можно представить в виде

$$\Delta c_q^\omega(\omega) = \lambda\big(1 - c_q(\omega)\big)\frac{\Delta\omega}{1-\omega},$$
$$\Delta c_q^w(\omega) = \lambda\sigma c_q(\omega)\big(1 - c_q(\omega)\big)\varepsilon(\omega)\Delta w.$$

Здесь λ — коэффициент, описывающий удельную скорость возникновения и развития новой фазы; σ — среднеквадратичное отклонение величины объемного содержания c_q от своего математического ожидания; w — стандартный винеровский процесс;

$$\Delta w = \varepsilon(\omega)\sqrt{\frac{\Delta\omega}{1-\omega}},$$

$\varepsilon(\omega) = N(0,1)$ — случайная величина с нормальным законом распределения, нулевым средним значением $\overline{\varepsilon(\omega)} = 0$ и единичной дисперсией $\overline{\varepsilon^2(\omega)} = 1$ [23].

Вычисляя приращение величины объемного содержания

$$\Delta c_q(\omega) = \lambda\Big(\frac{\Delta\omega}{1-\omega} + \sigma c_q(\omega)\varepsilon(\omega)\sqrt{\frac{\Delta\omega}{1-\omega}}\Big)\big(1 - c_q(\omega)\big)$$

и переходя к пределу при $\Delta\omega \to 0$, получаем стохастическое дифференциальное уравнение Ито, описывающее процесс изменения объемного содержания новой фазы c_q нестабильного материала в зависимости от уровня структурных деформаций [21]:

$$dc_q(\omega) = P\big(c_q(\omega)\big)d\omega + Q\big(c_q(\omega)\big)\sqrt{d\omega}, \tag{32}$$

где

$$P\big(c_q(\omega)\big) = \frac{\lambda\big(1 - c_q(\omega)\big)}{1-\omega}, \quad Q\big(c_q(\omega)\big) = \frac{\lambda\sigma\varepsilon(\omega)\big(1 - c_q(\omega)\big)}{\sqrt{1-\omega}} \tag{33}$$

— коэффициенты уравнения (32).

Начальное условие для уравнения (32) задается выражением

$$c_q\big|_{\omega=0} = 0. \tag{34}$$

Алгоритм численного решения уравнения (32) с коэффициентами (33) и условием (34) методом Эйлера–Маруямы [23] имеет вид

$$c_q^{(i+1)} = c_q^{(i)} + \lambda(1 - c_q^{(i)})\Big(\frac{\Delta\omega^{(i)}}{(1-\omega^{(i)})} + \sigma c_q^{(i)}\varepsilon^{(i)}\sqrt{\frac{\Delta\omega^{(i)}}{1-\omega^{(i)}}}\Big). \tag{35}$$

При реализации алгоритма (35) на каждом малом шаге $\Delta\omega^{(i)} > 0$ (начиная с $\omega^{(0)} = 0$):

1) генерируется случайное число $\varepsilon^{(i)} = \varepsilon(\omega^{(i)})$;
2) вычисляется следующее значение $c_q^{(i+1)}$.

В результате формируются последовательности $\{\omega^{(i)}\}$ и $\{c_q^{(i)}\}$, образующие на координатной плоскости набор точек $\{\omega^{(i)}, c_q^{(i)}\}$ и соответствующую стохастическую траекторию. Каждое повторение алгоритма порождает новую траекторию благодаря случайному характеру $\varepsilon^{(i)}$.

В численных расчетах отрезок $0 \leqslant \omega \leqslant 1$ разбивался на $n = 100$ равных частей с шагом $\Delta\omega^{(i)} = \Delta\omega = 0.01$.

Следует отметить, что вблизи начальной $\{\omega^{(0)} = 0, c_q^{(0)} = 0\}$ и конечной $\{\omega^{(n+1)} = 1, c_q^{(n+1)} = 1\}$ точек случайная функция $c_q = c_q(\omega)$ становится практически детерминированной.

Для вычисления математического ожидания $\overline{c_q}$ случайной функции c_q необходимо статистически усреднить стохастическое дифференциальное уравнение (32)

$$\frac{d\,\overline{c_q}}{d\omega} = \frac{\lambda(1 - \overline{c_q})}{1 - \omega}, \tag{36}$$

с начальным условием

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

Решение задачи Коши (36), (37) имеет вид

$$\overline{c_q} = 1 - (1 - \omega)^{\lambda}. \tag{38}$$

Сравнение результатов численного решения задачи Коши (36), (37) с численными значениями статистического среднего, вычисленного по $m = 50$ реализациям алгоритма (35), демонстрирует их практическое совпадение.

На рис. 3 представлены численные реализации решений алгоритма (35) в виде стохастических траекторий функции роста объемного содержания c_q от уровня структурных деформаций ω, а также кривая ее математического ожидания $\overline{c_q}$, построенная по формуле (38).

Применим полученные результаты к расчету диаграмм сверхупругого осесимметричного растяжения–сжатия монокристалла Au-47.5 ат.% Cd [24].

В данном случае ненулевой компонент тензора макроскопических напряжений единственный:

$$\langle\sigma_{11}\rangle \neq 0,$$

остальные компоненты равны нулю.

Из всех компонентов тензоров макроскопических полных деформаций $\langle\varepsilon_{ij}\rangle$ и остаточных деформаций e^*_{ij} отличными от нуля являются диагональные элементы: $\langle\varepsilon_{11}\rangle$, $\langle\varepsilon_{22}\rangle$, $\langle\varepsilon_{33}\rangle$ и e^*_{11}, e^*_{22}, e^*_{33}. В силу осесимметричности задачи выполняются соотношения

$$\langle\varepsilon_{22}\rangle = \langle\varepsilon_{33}\rangle, \quad e^*_{22} = e^*_{33}.$$

Условие несжимаемости для остаточных деформаций

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

позволяет получить

$$e^*_{22} = e^*_{33} = -e^*_{11}/2.$$

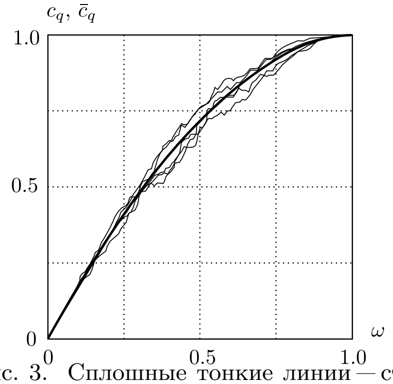

Рис. 3. Сплошные тонкие линии — стохастические траектории функции объемного содержания c_q от уровня структурных деформаций ω, построенные в соответствии с численными реализациями алгоритма (35); сплошная жирная линия — кривая математического ожидания $\overline{c_q}$, построенная по формуле (38) при значении параметра $\lambda = 1.8$

[Figure 3. Thin solid lines — stochastic trajectories of the volumetric content function c_q versus the level of structural deformations ω constructed according to numerical implementations of the algorithm (35); bold solid line — mathematical expectation curve $\overline{c_q}$ constructed using the formula (38) with the parameter value $\lambda = 1.8$]

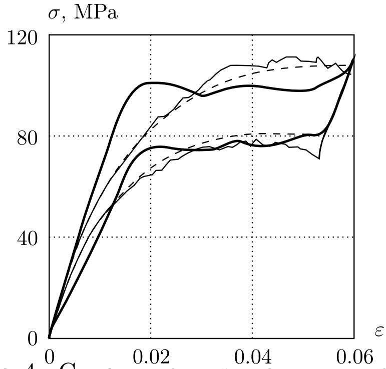

Рис. 4. Сплошные жирные линии — экспериментальные диаграммы сверхупругого поведения монокристалла Au-47.5 ат.% Cd [24]; сплошные тонкие линии — теоретические диаграммы сверхупругого растяжения–сжатия, рассчитанные по формулам (14), (15), (22), (27), (29), (30), (35), (38)–(40) при следующих значениях параметров: $E_p = 6802.72$ МПа, $E_q = 4006.42$ МПа, $\nu_p = 0.29$, $\nu_q = 0.30$, $\sigma_p = 8.11$ МПа, $\sigma_q = 6.05$ МПа, $n_p = 469.20$ МПа, $n_q = 270.01$ МПа, $\Omega = 0.08$; штриховые линии — кривые математического ожидания

[Figure 4. Bold solid lines — experimental diagrams of the superelastic behavior of the Au-47.5 at.% Cd monocrystal [24]; thin solid lines — theoretical diagrams of superelastic tension–compression calculated using formulas (14), (15), (22), (27), (29), (30), (35), (38)–(40) with the following parameter values: $E_p = 6802.72$ MPa, $E_q = 4006.42$ MPa, $\nu_p = 0.29$, $\nu_q = 0.30$, $\sigma_p = 8.11$ MPa, $\sigma_q = 6.05$ MPa, $n_p = 469.20$ MPa, $n_q = 270.01$ MPa, $\Omega = 0.08$; dashed lines — mathematical expectation curves]

В области упругого деформирования макроскопические поперечные деформации $\langle\varepsilon_{22}\rangle = \langle\varepsilon_{33}\rangle$ связаны с продольной деформацией $\langle\varepsilon_{11}\rangle$ через эффективный коэффициент Пуассона ν^*:

$$\langle\varepsilon_{22}\rangle = \langle\varepsilon_{33}\rangle = -\frac{1}{2}\nu^*\langle\varepsilon_{11}\rangle, \quad \nu^* = \frac{3K^* - 2\mu^*}{6K^* + 2\mu^*}.$$

Макроскопический закон Гука (14) и закон упрочнения (21) для случая одноосного растяжения–сжатия принимают вид

$$\sigma = \begin{cases} E^*\varepsilon, & \varepsilon \leqslant \varepsilon_p^*; \\ \dfrac{E^*}{E^* + 3n_p^*}\sigma_p^* + \dfrac{3E^* n_p^*}{E^* + 3n_p^*}\varepsilon, & \varepsilon \geqslant \varepsilon_p^*; \end{cases} \tag{39}$$

$$\sigma = \begin{cases} E^*\varepsilon, & \varepsilon \leqslant \varepsilon_q^*; \\ \dfrac{E^*}{E^* + 3n_q^*}\sigma_q^* + \dfrac{3E^* n_q^*}{E^* + 3n_q^*}\varepsilon, & \varepsilon \geqslant \varepsilon_q^*. \end{cases} \tag{40}$$

Здесь $\sigma = \langle\sigma_{11}\rangle$ и $\varepsilon = \langle\varepsilon_{11}\rangle$ — макроскопические напряжение и деформация при одноосном нагружении; $\sigma_p^* = \sqrt{3/2}s_p^*$, $\sigma_q^* = \sqrt{3/2}s_q^*$ — пределы прямого и обратного фазовых переходов; $\varepsilon_p^* = \sigma_p^*/E^*$, $\varepsilon_q^* = \sigma_q^*/E^*$ — граничные деформации, разделяющие области упругого и сверхупругого поведения.

На рис. 4 представлено сравнение теоретических диаграмм сверхупругого растяжения–сжатия, рассчитанных по формулам (14), (15), (22), (27), (29), (30), (35), (38)–(40), с экспериментальными данными для монокристалла Au-47.5 ат.% Cd [24]. Здесь жирные сплошные линии — экспериментальные кривые; тонкие сплошные линии — стохастические траектории; штриховые линии — кривые математического ожидания.

Заключение. Разработана новая стохастическая модель изотермических фазовых превращений первого рода в нестабильной однородной упругой среде. Модель описывает процесс зарождения и эволюции новой фазы в объеме исходной фазы, включая

– формирование зародышей новой фазы в виде изолированных включений;
– развитие стохастических структур в форме взаимопроникающих каркасов;
– завершающую стадию, при которой новая фаза образует связную матрицу с включениями остатков исходной фазы.

В рамках разработанной модели получены следующие результаты.

1. Вычислены эффективные модули упругости материала с изменяющейся стохастической структурой. Показано, что их значения локализованы внутри вилки Хашина–Штрикмана.
2. Получены стохастические дифференциальные уравнения для параметра связности фаз и для описания прямого и обратного фазовых переходов.
3. Установлены макроскопические критерии фазовых превращений, определены их эффективные пределы и коэффициенты упрочнения.

Результаты численного моделирования продемонстрировали высокую согласованность с экспериментальными данными для монокристаллов Au-47.5 ат.% Cd [24], что подтверждает адекватность предложенного подхода.

Конфликт интересов. Автор заявляет об отсутствии конфликта интересов.

Ответственность автора. Автор несет полную ответственность за подготовку окончательной версии рукописи и подтверждает ее одобрение для публикации.

Финансирование. Исследование выполнено без привлечения внешнего 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. EDN: RDKNHT.

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. EDN: SAKMWR.
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. EDN: TPPBQN.
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. EDN: VWWEBJ.
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. EDN: YFYNPD.
6. Трусов П. В., Волегов П. С., Исупова И. Л. [и др.] Многоуровневая модель для описания твердотельных фазовых превращений в многокомпонентных сплавах // *Вестник Пермского научного центра УрО РАН*, 2016. №4. С. 82–90. EDN: XHOMKN.
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. EDN: ZFCCHD.
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. EDN: UODJWG. DOI: https://doi.org/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. EDN: YUPEYL. DOI: https://doi.org/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. Alloys Comp.*, 2013. vol. 577 (Suppl. 1). pp. S83–S87. DOI: https://doi.org/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: https://doi.org/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: https://doi.org/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 // *Mater. Sci. Eng. A*, 2015. vol. 621. pp. 76–81. DOI: https://doi.org/10.1016/j.msea.2014.10.054.
14. Lobo P. S., Almeida J., Guerreiro L. Shape memory alloys behaviour: A review // *Procedia Eng.*, 2015. vol. 114. pp. 776–783. DOI: https://doi.org/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. Solids Struct.*, 2015. vol. 64–65. pp. 51–61. DOI: https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2015.03.013.
16. Cisse C., Zaki W., Ben Zineb T. A review of constitutive models and modeling techniques for shape memory alloys // *Int. J. Plasticity*, 2016. vol. 76. pp. 244–284. DOI: https://doi.org/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. Research Commun.*, 2016. vol. 74. pp. 20–26. DOI: https://doi.org/10.1016/j.mechrescom.2016.03.005.

18. 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. EDN: YOYJOH. DOI: https://doi.org/10.14498/vsgtu1626.
19. Ильина Е. А., Сараев Л. А. Влияние кинетики фазовых превращений на сверхупругое упрочнение нестабильного материала // *Современные материалы, техника и технологии*, 2017. № 7. С. 28–38. EDN: YLTBDG.
20. Сараев Л. А. *Математическое моделирование упругопластических свойств многокомпонентных композиционных материалов*. Самара: Самарский научный центр, 2017. 222 с. EDN: SHDNIT.
21. Сараев Л. А. К теории упругости микронеоднородных сред, учитывающей стохастические изменения связности составляющих компонентов // *Вестник ПНИПУ. Механика*, 2021. № 2. С. 132–143. EDN: OYVQLK. DOI: https://doi.org/10.15593/perm.mech/2021.2.12.
22. Cahn R. W., Haasen P. *Physical Metallurgy*. Amsterdam: North-Holland Physics Publ., 1983. xxxiv+1957 pp.
23. Кузнецов Д. Ф. *Стохастические дифференциальные уравнения: теория и практика численного решения*. СПб.: Политехнич. ун-т, 2007. 777 с. EDN: QJRVXX. DOI: https://doi.org/10.18720/SPBPU/2/s17-228.
24. Беляев С. П., Волков А. Е., Ермолаев В. А. [и др.] *Материалы с эффектом памяти формы*. Т. 3. СПб.: НИИХ СПбГУ, 1998. 474 с.

Vestn. Samar. Gos. Tekhn. Univ., Ser. Fiz.-Mat. Nauki
[J. Samara State Tech. Univ., Ser. Phys. Math. Sci.], 2024, vol. 28, no. 4, pp. 721–739
ISSN: 2310-7081 (online), 1991-8615 (print) https://doi.org/10.14498/vsgtu2129

MSC: 74A60, 74A40, 74A05

Stochastic superelastic properties of materials with phase transformations

L. A. Saraev

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

Abstract

The study is devoted to the impact of stochastic isothermal phase transformations in an unstable material on its superelastic hardening.

A stochastic differential equation is derived to describe the dynamics of nucleation, growth of the new phase volume, and its interaction with the parent phase, depending on the level of irreversible structural deformations.

Macroscopic constitutive relations are established for the unstable material, incorporating the stochastic nature of phase transformations and their dependence on structural deformations. Effective elastic moduli of the material are calculated based on these relations.

Stochastic differential equations for direct and reverse phase transitions are formulated.

Numerical simulations demonstrate strong agreement with experimental data, validating the proposed model.

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

Received: 5th November, 2024 / Revised: 16th December, 2024 / Accepted: 20th December, 2024 / First online: 25th December, 2024

Conflict of interest. The author declares no conflict of interest.

Author's Responsibilities. The author is solely responsible for preparing the final version of the manuscript and approves it for publication.

Funding. The research was conducted without external funding.

Mechanics of Solids
Research Article

Please cite this article in press as:
Saraev L. A. Stochastic superelastic properties of materials with phase transformations, *Vestn. Samar. Gos. Tekhn. Univ., Ser. Fiz.-Mat. Nauki* [J. Samara State Tech. Univ., Ser. Phys. Math. Sci.], 2024, vol. 28, no. 4, pp. 721–739. EDN: NOXAGA. DOI: 10.14498/vsgtu2129 (In Russian).

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

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). EDN: RDKNHT.
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. EDN: SKPPWJ. DOI: https://doi.org/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. EDN: UFVFZX. DOI: https://doi.org/10.3103/S0025654415020077.
4. Experimental study of the interaction of phase and structural deformations in alloys with shape memory, *Mekh. Kompoz. Mater. Konstr.*, 2016, vol. 22, no. 1, pp. 85–98 (In Russian). EDN: VWWEBJ.
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. EDN: XXPTSH. DOI: https://doi.org/10.1134/S0036029517100147.
6. Trusov P. V., Volegov P. S., Isupova I. L., et al. Multilevel model for describing solid phase transformations in multicomponent alloys, *Vestnik Permskogo Nauchnogo Tsentra UrO RAN*, 2016, no. 4, pp. 82–90 (In Russian). EDN: XHOMKN.
7. Tikhomirova K. A. Isothermal deformation of shape memory alloy in different temperature ranges. Uniaxial case, *Mekh. Kompoz. Mater. Konstr.*, 2017, vol. 23, no. 2, pp. 263–282 (In Russian). EDN: ZFCCHD.
8. Tikhomirova K. A. Phenomenological modeling of phase and structural deformations in shape memory alloys. One-dimensional case, *Computational Continuum Mechanics*, 2018, vol. 11, no. 1, pp. 36–50 (In Russian). EDN: UODJWG. DOI: https://doi.org/10.7242/1999-6691/2018.11.1.4.
9. Tikhomirova K. A. Experimental and theoretical study of the relationship between phase and structural deformations in alloys with shape memory, *PNRPU Mechanics Bulletin*, 2018, no. 1, pp. 40–57 (In Russian). EDN: YUPEYL. DOI: https://doi.org/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. Alloys Comp.*, 2013, vol. 577 (Suppl. 1), pp. S83–S87. DOI: https://doi.org/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: https://doi.org/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: https://doi.org/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, *Mater. Sci. Eng. A*, 2015, vol. 621, pp. 76–81. DOI: https://doi.org/10.1016/j.msea.2014.10.054.
14. Lobo P. S., Almeida J., Guerreiro L. Shape memory alloys behaviour: A review, *Procedia Eng.*, 2015, vol. 114, pp. 776–783. DOI: https://doi.org/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. Solids Struct.*, 2015, vol. 64–65, pp. 51–61. DOI: https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2015.03.013.
16. Cisse C., Zaki W., Ben Zineb T. A review of constitutive models and modeling techniques for shape memory alloys, *Int. J. Plasticity*, 2016, vol. 76, pp. 244–284. DOI: https://doi.org/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. Research Commun.*, 2016, vol. 74, pp. 20–26. DOI: https://doi.org/10.1016/j.mechrescom.2016.03.005.

18. 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 (In Russian). EDN: YOYJOH. DOI: https://doi.org/10.14498/vsgtu1626.
19. Ilyina E. A., Saraev L. A. Effect of the kinetics of phase transformations on the superelastic hardening of an unstable material, *Sovrem. Mater. Tekhnika Tekhnol.*, 2017, no. 7, pp. 28–38 (In Russian). EDN: YLTBDG.
20. Saraev L. A. *Matematicheskoe modelirovanie uprugoplasticheskikh svoistv mnogokomponentnykh kompozitsionnykh materialov* [Mathematical Modeling of Elastoplastic Properties of Multicomponent Composite Materials]. Samara, Samara Scientific Center, 2017, 222 pp. (In Russian). EDN: SHDNIT.
21. Saraev L. A. On the theory of elasticity of microinhomogeneous media with account for stochastic changes in the connectivity of constituent components, *PNRPU Mechanics Bulletin*, 2021, no. 2, pp. 132–143 (In Russian). EDN: OYVQLK. DOI: https://doi.org/10.15593/perm.mech/2021.2.12.
22. Cahn R. W., Haasen P. *Physical Metallurgy*. Amsterdam, North-Holland Physics Publ., 1983, xxxiv+1957 pp.
23. Kuznetsov D. F. *Stokhasticheskie differentsial'nye uravneniia: teoriia i praktika chislennogo resheniia* [Stochastic Differential Equations: Theory and Practice of Numerical Solution]. St. Petersburg, Polytechnic Univ., 2007, 777 pp. (In Russian). EDN: QJRVXX. DOI: https://doi.org/10.18720/SPBPU/2/s17-228.
24. Belyaev S. P., Volkov A. E., Ermolaev V. A., et al. *Materialy s effektom pamiati formy* [Shape Memory Materials], vol. 3. St. Petersburg, NIIKh SPbGU, 1998, 474 pp. (In Russian)