

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ КЛЕТОЧНЫХ АВТОМАТОВ К МОДЕЛИРОВАНИЮ РАЗУПРОЧНЕНИЯ

В статье показано, как с помощью клеточных автоматов удалось разработать новую модель разупрочнения со статической рекристаллизацией и статическим восстановлением. Внедрение в модель учета восстановления позволило объяснить показатель Аврами меньший, чем три. Новая модель, основанная на клеточных автоматах, позволяет получать процессы не доступные в традиционных моделях, когда при разупрочнении наблюдаются изменения в её скорости. Показаны также результаты экспериментальных исследований, с помощью которых подтверждается эффективность новой модели.

КЛЕТОЧНЫЕ АВТОМАТЫ, РЕКРИСТАЛЛИЗАЦИЯ, МИКРОСТРУКТУРА.

У статті показано, як за допомогою клітинних автоматів вдалося розробити нову модель ослаблення з статичною рекристалізацією і статичним відновленням. Впровадження до моделі відновлення дозволило пояснити показник Аврамі менший, ніж три. Нова модель, побудована на клітинних автоматах, дозволяє отримувати результати, котрі не доступні в традиційних моделях, коли при ослабленню спостерігаються зміни в швидкості. Показані також результати експериментальних досліджень, за допомогою яких підтверджується ефективність нової моделі.

КЛІТИННІ АВТОМАТИ, РЕКРИСТАЛІЗАЦІЯ, МІКРОСТРУКТУРА.

In the paper it is shown, how by means of cellular automata it was possible to develop new model of softening with static recrystallization and static recovery. Introduction in the model recovery has allowed to explain Avrami exponent smaller, than three. The new model based on cellular automata, allows to receive results, which are not available in traditional models when softening rate is observed. The results of experimental studies, which confirmed the effectiveness of the new model, are also shown.

CELLULAR AUTOMATA, RECRYSTALLIZATION, MICROSTRUCTURE.

Введение

Предыстория применения авторами клеточных автоматов к разупрочнению началась около восьми лет назад, когда столкнулись с проблемой учета динамической и статической рекристаллизации в моделях напряжения текучести, основанных на плотности дислокаций. Основным является следующее уравнение:

$$\frac{d\rho}{d\varepsilon} = U(\varepsilon) - \Omega(\rho), \quad (1)$$

где $U(\varepsilon)$ ответственно за генерацию и накопление дислокаций (упрочнение), $\Omega(\rho)$ представляет их аннигиляцию (динамическое восстановление).

Проблемы с использованием уравнения (1) появляются тогда, когда необходимо ввести в него динамическую рекристаллизацию, но еще большие, когда требуется учесть разупрочнение после деформации. Учет динамической рекристаллизации часто осуществлением путем искусственного введения дополнительного члена [1], что в определенной

степени решает проблему поведения материала, хотя и физически слабо обосновано. Проблема же разупрочнения в рамках уравнения (1) не решается, поскольку при отсутствии деформации левая сторона уравнения (1) теряет смысл. Переход к производным по времени вместо производной по деформации решает вопрос частично, поскольку получить формулу, которая бы одинаково адекватно работала как во время деформации, так и после неё никому не удавалось, поскольку, как уже вспоминалось, введение дополнительного слагаемого ответственного за рекристаллизацию трудно обосновать теоретически.

Именно это было той первой проблемой, с которой авторы столкнулись несколько лет назад. Попытки сконструировать такое уравнение, чтобы согласовать динамическую и статическую рекристаллизацию наталкивались, как мы поняли позже, на препятствия принципиальные, концептуальные. Но именно тогда и был обращен взор на клеточные автоматы как средство, которое должно было помочь понять, что происходит в материале и как это можно описать математически. Была создана упрощенная модель динамической рекристаллизации, основанная на клеточных автоматах. Первым заданием модели было получение результатов, которые могли бы отразить такие изменения напряжения текучести, которые можно получить экспериментально, либо хорошо известны из литературы. Тогда сама попытка создать модель уже натолкнула на решение проблемы. В чем же заключалось решение?

Создавая модель динамической рекристаллизации с помощью клеточных автоматов, первым делом были разделены два явления. Явление деформации и связанные с ним изменения плотности дислокаций и напряжения текучести рассматривались независимо от процесса рекристаллизации. Рекристаллизация рассматривалась как два связанных процесса: образование новых зёрен и их рост. С появлением нового зерна плотность дислокации в нем падает, и рост осуществляется благодаря разнице в плотности дислокаций новых и старых зерен. Следовательно, средняя плотность дислокаций может быть вычислена, как средневзвешенное значение плотности дислокаций всех зерен, с учетом степени рекристаллизации. В результате, простым решением проблемы оказалось введение в уравнение, учитывающее рекристаллизацию, не слагаемого, а сомножителя, как это показано следующим уравнением:

$$\rho_{av} = \rho(1 - \chi), \quad (2)$$

где ρ_{av} – среднее значение плотности дислокаций, ρ определяется согласно уравнению (1), а χ – степень рекристаллизации.

Аналитическая модель, разработанная на основании уравнений (1) и (2), была подробно описана [2, 3] и тщательно испытана [4, 5]. При этом она продемонстрировала прекрасные аппроксимирующие свойства.

Параллельно аналитической модели, получившей самостоятельную жизнь, развивалась модель, основанная на клеточных автоматах. Модель разрасталась и усложнялась. Кроме первого своего использования,

заключавшегося в моделировании динамической рекристаллизации, она постепенно расширяла свой диапазон применения. Вслед за динамической рекристаллизацией, были моделированы статическая рекристаллизация, фазовые превращения, кристаллизация (затвердевание) металла, получение мелкозернистой структуре в процессах SPD. В модели стала учитываться реальная деформация, введена реорганизация клеточного пространства при больших деформациях. Далее явления объединялись, что привело к возможности моделировать изменение микроструктуры в технологических процессах. Однако некоторые факты оставались без внимания. Природа этих фактов раскрыта в следующем разделе.

Постановка задачи

Первые результаты и примеры использования клеточных автоматов для определения напряжения текучести и моделирования процесса рекристаллизации продемонстрировали их высокую эффективность [6, 7]. Некоторые результаты представлены на Рис. 1 и 2. Рис. 1 представляет кривые напряжения текучести, полученные с применением клеточных автоматов, а Рис.2 соотношение Аврами для статической рекристаллизации, полученное во время моделирования этого процесса клеточными автоматами.

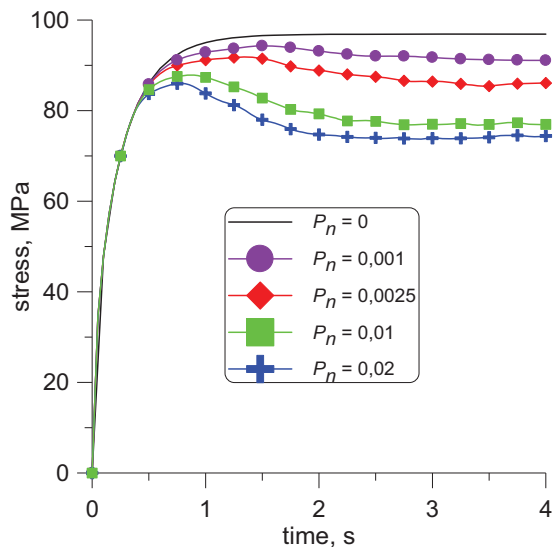


Рис.1. Напряжение текучести с динамической рекристаллизацией [6]

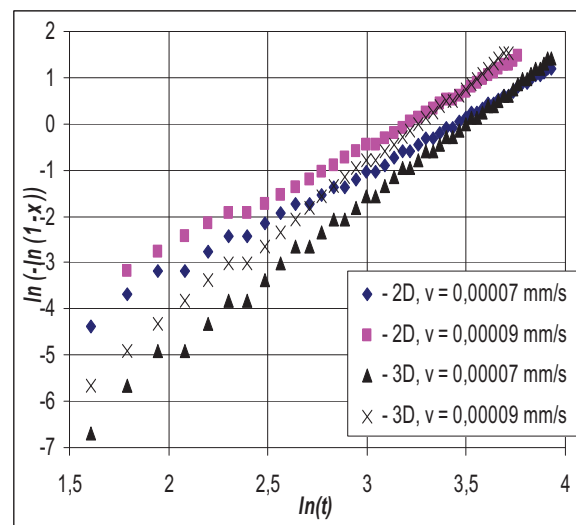


Рис. 2. Соотношение Аврами для статической рекристаллизации [7]

Кинетику рекристаллизации (степень рекристаллизации χ) как функцию времени обычно описывают следующим образом:

$$\chi = 1 - \exp(-at^n), \tag{3}$$

где t – время, a – коэффициент, который зависит от условий рекристаллизации n – показатель степени Аврами, который согласно теории принимает значение 3 или 4.

Фактически, Рис.2 является анаморфным представлением уравнения (3) и позволяет легко определить коэффициент a и показатель степени n . Как можно увидеть на Рис.2, полученные кривые практически идеально соответствуют кривым с показателем степени n равным 2 для двухмерной

модели и 3 для трехмерной. Получены также кривые с теоретическим значением 4. Полученные столь точные значения подтвердили эффективность клеточных автоматов, которые бескритично использовались в дальнейших исследованиях. В свое оправдание можем заметить, что аналогично использовались клеточные автоматы другими автоматами во всем мире. В чем же заключается проблема?

Рассматривая реальное поведение материала во время разупрочнения, можно отметить, что обычно показатель Аврамы принимает значения меньше двух ($n < 2$), и, следовательно, противоречит основным положениям теории КДМА (Колмогорова-Джонсона-Мела-Аврамы) и получаемым клеточными автоматами результатам. На практике, в эмпирических моделях статической рекристаллизации принимают в уравнении (3) произвольное значение n , которое получают из экспериментальных данных.

Таким образом, возникает задача согласования теоретических положений с данными экспериментальными и учет дополнительных факторов в модели клеточных автоматов.

Согласование моделей

Как показывают вычисления с помощью клеточных автоматов при постоянной скорости роста зерна невозможно получить иной показатель степени n , чем 2 для двухмерной модели и 3 для трехмерной. Когда большинство исследователей использует двухмерные модели, а показатель n обычно принимает значения в диапазоне 1,3-1,7, на эту разницу не обращают внимание. Но в трехмерных моделях, этой разницей уже невозможно пренебречь. И тогда приходится отвечать на вопрос, из-за чего возникает такая разница.

Если вернуться к основной модели и проанализировать модифицированную формулу (3), где вводим количество новых растущих зерен N и скорость роста зерен v (скорость миграции границ):

$$\chi = 1 - \exp\left(-\frac{\pi}{3} N v^3 t^3\right), \quad (4)$$

то можно заметить, что только один её элемент может изменяться в процессе рекристаллизации, а именно скорость роста зерна v . Известно также, что показатель Аврамы n может отличаться от теоретического значения 3, когда скорость v является функцией времени t . Далее, при постоянной температуре, когда мобильность границ остается неизменной, только накопленная энергия деформации, которая зависит от плотности дислокаций, может повлиять на изменение скорости v . Таким образом, плотность дислокаций нерекристаллизованных зёрен ρ должна изменяться. А снижение плотности дислокаций ρ , в свою очередь, может происходить в них только в процессе статического восстановления. Тогда в модель развития плотности дислокаций (1) можно добавить член $R(\rho)$, отвечающий за статическое восстановление. После перехода от производной по деформации к производной по времени получаем:

$$\dot{\rho} = U(\varepsilon)\dot{\varepsilon} - \Omega(\rho)\dot{\varepsilon} - R(\rho), \quad (5)$$

Фактически, статическое восстановление влияет на разупрочнение материала двумя путями (2): уменьшая плотность дислокаций нерекристаллизованных зерен ρ (5) и снижая скорость роста зерен, то есть, влияя на степень рекристаллизации χ . Во время деформации работают все три составляющих, в ее отсутствии только последний член.

Предположим, что функция $R(\rho)$ линейная, то есть скорость уменьшения плотности дислокаций пропорциональна плотности дислокаций: $R(\rho) \propto \rho$. Тогда решение уравнения (2) можно представить в виде:

$$\frac{\rho}{\rho_0} = 1 - f + f \exp\left(-\frac{t}{t_r}\right), \quad (6)$$

При неизменной температуре скорость v пропорциональна плотности дислокаций и может быть получена из уравнения (6) с учетом начальной максимальной скорости v_0 :

$$\frac{v}{v_0} = 1 - f_1 \exp\left(-\frac{t}{t_r}\right), \quad (7)$$

Для упрощения расчетов введем понятие приведенной скорости роста зерна $\tilde{v} = v^3 \sqrt{\frac{\pi N}{3}}$, которая характеризует скорость роста всех зерен в единичном объеме. Тогда уравнение (4) можно записать в следующем виде:

$$\chi = 1 - \exp\left[-\left(\int_{\tau=0}^t \tilde{v} d\tau\right)^3\right], \quad (8)$$

Степень разупрочнения x , которая является результатом действия рекристаллизации и восстановления, может быть вычислена в рассматриваемой модели на основании текущей средней ρ_{av} и начальной ρ_0 плотности дислокаций:

$$x = 1 - \frac{\rho_{av}}{\rho_0} = 1 - \frac{\rho(1 - \chi)}{\rho_0} = 1 - \left[1 - f + f \exp\left(-\frac{t}{t_r}\right)\right] \left\{ \exp\left[-\left(\int_{\tau=0}^t \tilde{v} d\tau\right)^3\right] \right\}, \quad (9)$$

Таким образом, в формуле (9) первый сомножитель (в квадратных скобках) описывает статическое восстановление, а второй (в фигурных скобках) кинетику рекристаллизации. В результате кинетику разупрочнения определяют три параметра: начальная приведенная скорость \tilde{v}_0 , постоянная времени процесса восстановления t_r и уровень восстановления f .

Результаты расчетов

Для подтверждения изложенного выше решения были изменены клеточные автоматы в части определения плотности дислокаций ρ (6) и скорости роста зерен (7). В первых тестах анализировалось влияние

времени восстановления на соотношение Аврами. Результаты моделирования с помощью клеточных автоматов представлены на Рис 3. Таким образом, можно увидеть, что уменьшение постоянной времени процесса восстановления и приближение её значения к длительности процесса рекристаллизации приводит к уменьшению показателя n .

Далее были смоделированы процессы, кинетика разупрочнения которых была получена в исследованиях экспериментальных с использованием метода релаксации напряжений. Предварительно были определены параметры модели клеточных автоматов с помощью вычислений по аналитической формуле (9), а затем эти параметры были уточнены в моделировании клеточными автоматами. Некоторые результаты приведены на рис. 4. Здесь же показаны результаты аппроксимации с помощью уравнения (3).

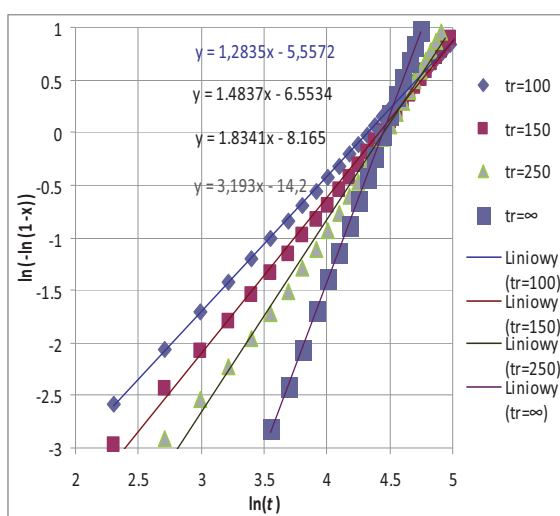


Рис. 3. Соотношение Аврами для разупрочнения металла

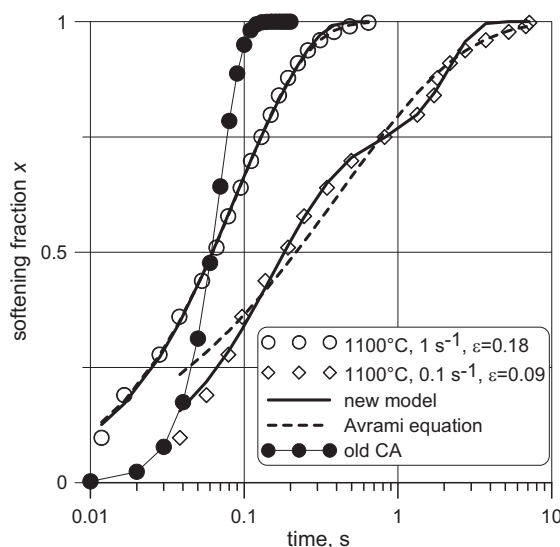


Рис. 4. Экспериментальные данные и кривые разупрочнения, полученные клеточными автоматами с учетом восстановления (5)-(7) и обычной моделью и без учета восстановления (3).

Легко можно увидеть, что кривая, на которой влияние восстановления малозаметно, одинаково хорошо аппроксимирована обеими моделями (результат, полученный предыдущей версией клеточных автоматов, значительно отличается от фактического). Для другой кривой, где нельзя пренебречь статическим восстановлением, качество новой модели заметно лучше.

Заключение и выводы

В статье представлена новая модель разупрочнения с учетом статического восстановления, основанная на клеточных автоматах. Учет восстановления позволил объяснить показатель Аврами n , меньший теоретического значения. Кроме того новая модель позволяет смоделировать процессы не доступные в традиционных моделях, когда при разупрочнении наблюдаются изменения в её скорости (ускорение или

замедление). Показаны также результаты экспериментальных исследований, с помощью которых подтверждается эффективность новой модели.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ordon J., Kuziak R., Pietrzyk M., History Dependant Constitutive Law for Austenitic Steel, Proc. Metal Forming 2000, Krakow, 747-753.
2. Svyetlichnyy D.S., The Coupled Model of a Microstructure Evolution and a Flow Stress Based on the Dislocation Theory, ISIJ Int. 2005, 45, 8, 1187-1193.
3. Svyetlichnyy D. S.: Modification of coupled model of microstructure evolution and flow stress: experimental validation, Material Science and Technology, 2009, 25, 8, 981-988.
4. Svyetlichnyy D., Pidvysots'ky V., Porywnanie modeli naprężenia uplastyczniającego, Rudy Metale, R 50, 2005, 10-11, 560-566.
5. Svyetlichnyy D.S., Pidvysotsky V., Kuziak R., Identyfikacja parametrów modelu naprężenia uplastyczniającego dla miedzi z dodatkiem chromu oraz testowanie w warunkach zmiennej prędkości odkształcenia, Mat. 13. Konf. Informatyka w Technologii Metali KomPlasTech2006, Szczawnica, Akapit, 2006, 241-250
6. Svyetlichnyy D., Milenin A, Modelowanie procesów rekrytalizacji za pomocą automatów kompyrkowych, Mat. Konf. KomPlasTech 2005, eds, Piela A., Lisok J., Grosman F., Ustroń 16-19 stycznia, 2004, 115-122.
7. Matachowski J., Svyetlichnyy D.S.: Tryjwymiarowy automat kompyrkowy do modelowania rekrytalizacji, Nowe technologie i osiągnięcia w metalurgii i inżynierii materiałowej, Wydawnictwo PC, 2006, 358-361.

Отримано 12.12.2011 р.