

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИЧЕСКОГО СЖАТИЯ ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО Al_2O_3

Л. А. Мержиевский

Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН, 630090 Новосибирск

В работе строится модель для описания поведения керамики Al_2O_3 при динамических и ударно-волновых нагрузках. За основу принята модель вязкоупругого тела максвелловского типа, которая применительно к керамическим материалам используется впервые. Конструируются уравнение изменения внутренней энергии при нешаровом тензоре деформации и зависимость времени релаксации касательных напряжений от параметров, характеризующих состояние среды. Функция времени релаксации основывается на описании микроструктурных механизмов необратимой деформации. Применимость модели проверяется сопоставлением результатов решения ряда задач динамического и ударно-волнового деформирования с экспериментальными данными.

ВВЕДЕНИЕ

Керамические материалы находят все большее применение в современных технологиях и конструкциях. С этим связан значительный интерес к исследованию поведения таких материалов в экстремальных условиях, в частности — при интенсивных динамических и ударных нагрузках. Керамические материалы привлекают также внимание исследователей как материалы, обладающие уникальными свойствами и поведением. Экспериментальному исследованию реакции керамических материалов на динамическое нагружение с высокими скоростями деформации посвящено значительное число работ. Не останавливаясь на их детальном обзоре, укажем только некоторые, наиболее характерные [1–3]. Чаще всего в экспериментальных исследованиях определяется ударная адиабата керамики или изучается откольное разрушение при нагружении материала плоской ударной волной. Часть работ посвящена численному моделированию динамических и ударно-волновых процессов. Следует отметить, что в качестве основной модели для описания поведения керамических материалов в этих работах используется модель упругопластического тела, в которую вводятся поправки, сводящиеся к замене постоянного предела текучести некоторой функцией, зависящей от скорости деформации, гидростатического давления и температуры [4, 5]. В качестве уравнения состояния обычно используется гидродинамическое уравнение состояния Ми — Грюнайзена. Напомним, что модель упругопластического тела возникла как

феноменологическая модель для описания необратимых деформаций металлов, причем первоначально она базировалась только на данных квазистатических экспериментов по однородному одноосному деформированию тонких стержней. В ряде работ [6–8] указывается на дополнительные проблемы, возникающие при применении данной модели к описанию динамических и ударно-волновых процессов даже в случае металлических материалов. Представляется, что в случае керамических материалов применимость этой модели, хотя бы и модифицированной, требует дополнительного обоснования. Это еще в большей степени касается уравнения состояния, которое, будучи записано в гидродинамической форме, не учитывает вклада больших касательных напряжений в упругую (холодную) составляющую энергии, что может оказать существенное влияние при описании процессов динамического деформирования керамики в области наиболее интересных для практики умеренных нагрузок. При этом форма уравнения состояния должна учитывать, что, в отличие от металлов, поликристаллические керамические материалы состоят из ионных кристаллов.

В данной работе для описания динамического и ударно-волнового деформирования поликристаллических керамических материалов предлагается использовать модель вязкоупругого тела максвелловского типа, хорошо зарекомендовавшую себя ранее при описании таких процессов в металлах [7, 9, 10]. Для замыкания модели для конкретной керамики — поликристаллического корунда (Al_2O_3) — строит-

ся уравнение состояния, учитывающее нешаровой вид тензора деформации (и, соответственно, тензора напряжений) и зависимость времени релаксации касательных напряжений от параметров, характеризующих состояние среды. Модель апробируется на сопоставлении результатов расчетов ряда динамических и ударно-волновых задач с соответствующими экспериментальными данными.

ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

Основные уравнения модели, в дифференциальной форме выражающие законы сохранения массы, импульса и энергии, и требования, предъявляемые к уравнению состояния, формулируются в [11]. При дальнейшем развитии этой континуальной модели в нее удалось ввести учет микроструктурных механизмов необратимого деформирования, приводящих к релаксации касательных напряжений [12]. Так как эти механизмы в металлах и керамических материалах, отличаясь качественно, имеют одну и ту же физическую природу, то распространение данной модели на случай керамических материалов представляется вполне оправданным. Способ учета микроструктурных механизмов через построение зависимости для времени релаксации касательных напряжений от параметров, характеризующих состояние среды, описывается ниже.

Законы сохранения полной системы уравнений математической модели имеют вид

$$\frac{du_i}{dt} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial r_j} = 0, \quad \frac{dE}{dt} - \frac{\sigma_{ij}}{\rho} \frac{\partial u_i}{\partial r_j} = 0. \quad (1)$$

К ним добавляются уравнения, описывающие эволюцию компонентов тензора эффективных упругих деформаций. В случае, когда в качестве меры эффективных упругих деформаций выбран метрический тензор $G = \|g_{ij}\|$, эволюционные уравнения записываются в виде

$$\frac{dG}{dt} + GW + W_0G + \frac{1}{\tau} \left(G + \frac{3\rho}{2R} I \right) = 0. \quad (2)$$

В уравнениях (1), (2) использованы обозначения: g_{ij} — компоненты метрического тензора эффективных упругих деформаций,

$$W = \left\| \frac{\partial u_i}{\partial r_i} \right\|, \quad W_0 = \left\| \frac{\partial u_i}{\partial r_i} \right\|, \quad R = \frac{\partial \rho}{\partial g_{kk}},$$

σ_{ij} — компоненты тензора напряжений, u_i — компоненты вектора скорости, ρ_0, ρ — начальная и текущая плотности, E — удельная упру-

гая энергия, τ — время релаксации касательных напряжений, t и r_j — время и пространственные координаты, $i, j = 1, 2, 3$, I — единичный тензор,

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + u_k \frac{\partial}{\partial r_k}, \quad \rho = \rho_0 \sqrt{\det G},$$

$$\sigma_{ij} = -2\rho g_{ik} \frac{\partial E}{\partial g_{kj}}.$$

Уравнение неразрывности в данной модели следует из уравнений (1), (2). Система (1), (2) замыкается уравнением, связывающим изменение удельной внутренней энергии E с компонентами нешарового тензора деформаций и энтропией S :

$$E = E(g_{ij}, S), \quad (3)$$

и зависимостью для времени релаксации:

$$\tau = \tau(g_{ij}, S). \quad (4)$$

Уравнения (3), (4) для рассматриваемой модели являются составляющими уравнения состояния среды. Их построение для выбранного керамического материала — одна из целей данной работы.

Для рассматриваемых в работе задач можно ограничиться одномерным нестационарным вариантом уравнений (1), (2). В этом случае задачи формулируются в главных осях тензора деформаций (и тензора напряжений); тогда вместо метрического тензора удобно использовать логарифмический тензор деформации Генки H , связанный с G :

$$H = (-1/2) \ln G$$

и

$$H = \begin{pmatrix} h_1 & 0 & 0 \\ 0 & h_2 & 0 \\ 0 & 0 & h_3 \end{pmatrix},$$

h_i — логарифмы коэффициентов растяжения вдоль главных осей. В итоге в плоском одномерном нестационарном случае система (1)–(4) принимает вид

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2 - \sigma_1)}{\partial r} = 0,$$

$$\frac{\partial[\rho(E + u^2/2)]}{\partial t} + \frac{\partial[\rho u(E + u^2/2) - \sigma_1 u]}{\partial r} = 0,$$

$$\frac{\partial h_2}{\partial t} + u \frac{\partial h_2}{\partial r} + \frac{d_2}{\tau} = 0, \quad \frac{\partial h_3}{\partial t} + u \frac{\partial h_3}{\partial r} + \frac{d_3}{\tau} = 0,$$

$$E = E(h_i, S), \quad \tau = \tau(h_i, S), \quad (5)$$

$$\sigma_1 = \rho \frac{\partial E}{\partial h_1}, \quad \sigma_2 = \rho \frac{\partial E}{\partial h_2}, \quad \sigma_3 = \rho \frac{\partial E}{\partial h_3},$$

$$T = \frac{\partial E}{\partial S}, \quad \rho = \frac{\rho_0}{\exp(h_1 + h_2 + h_3)},$$

$$d_1 = h_1 - q, \quad d_2 = h_2 - q, \quad d_3 = h_3 - q,$$

$$q = \frac{1}{3} \ln \frac{\rho_0}{\rho} = \frac{1}{3} (h_1 + h_2 + h_3),$$

T — температура среды.

ПОСТРОЕНИЕ УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ

Рассмотрим принципы и метод построения уравнения состояния (3), необходимого для замыкания и конкретизации модели. Предполагаемая связь удельной внутренней энергии с компонентами тензора деформации, очевидно, должна включать не сами компоненты тензора, а его инварианты. В принятых обозначениях первый инвариант тензора деформации δ , второй инвариант D и третий Δ запишутся в виде

$$\delta = \rho / \rho_0 = \exp[-(h_1 + h_2 + h_3)],$$

$$D = \frac{d_1^2 + d_2^2 + d_3^2}{2}, \quad \Delta = d_1 d_2 d_3 = \frac{d_1^3 + d_2^3 + d_3^3}{3}.$$

В наиболее распространенном подходе, пришедшем в механику деформируемого твердого тела из газовой динамики, при построении уравнения состояния полагается, что изменение удельной внутренней энергии вызвано изменением плотности упругой энергии объемного сжатия. Это означает, что уравнение типа (3) ищется в виде

$$E = E(\delta, S), \quad (6)$$

что оправданно, если тензор деформации шаровой или близок к шаровому. Тогда, например, в приближении идеального упругопластического тела для учета энергии формоизменения вместо (6) обычно используют уравнение состояния в форме

$$p = p(\delta, S), \quad \sigma_1 = -p + \frac{4}{3} \sigma_s,$$

где среднее (гидростатическое) давление

$$p = -(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3)/3,$$

σ_s — предел текучести. Для перехода к (6) можно применить термодинамическое соотношение

$$p = \rho^2 \frac{\partial E}{\partial \rho} = \rho_0 \delta^2 \frac{\partial E}{\partial \delta}.$$

Не останавливаясь на критике такого подхода, укажем, что его основные недостатки при описании ударно-волновых процессов обсуждались в [6–8].

Развиваемая в данной работе модель ориентирована на описание широкого спектра состояний и процессов, включая детальное описание переходного (от упругого к гидродинамическому) диапазона, когда сжатие еще относительно невелико, а нелинейные эффекты уже существенны. В этом случае тензор деформации (и напряжений) существенно нешаровой, т. е. в (3) необходимо учитывать вклад как объемного сжатия, так и формоизменения. В таком случае наиболее полная связь E с g_{ij} должна иметь вид

$$E = E(\delta, D, \Delta, S). \quad (7)$$

Поскольку необходимых для построения (7) экспериментальных данных недостаточно, ограничимся построением зависимости вида

$$E = E(\delta, D, S). \quad (8)$$

Естественно, это несколько ограничивает применимость полученного соотношения, однако можно надеяться, что область экстраполяции (8) может быть расширена за счет выбора коэффициентов уравнения. Заметим также, что величина Δ при малых деформациях сама является величиной третьего порядка малости, что дополнительно оправдывает возможность построения уравнения состояния в форме (8).

Как в (3), так и в (7), (8) не отражено влияние скорости деформации на затраты энергии в процессах динамического деформирования. В реализуемом подходе такой учет осуществляется при построении второго замыкающего соотношения — зависимости для времени релаксации касательных напряжений.

Следуя идеям, сформулированным при построении уравнения состояния Ми — Грюнайна, представим (8) в виде

$$E(\delta, D, S) = E_e(\delta, D) + E_T(\delta, S), \quad (9)$$

где E_e и E_T — упругая (холодная) и тепловая составляющие внутренней энергии. В тепловой составляющей не будем выделять слагаемые, соответствующие тепловому движению ядер атомов и тепловому возбуждению электронов, так как строящаяся модель ориентирована, в первую очередь, на описание поведения вещества в области умеренных нагрузок и температур, когда электронной составляющей E

можно вообще пренебречь. В качестве зависимости для упругой составляющей от δ примем выражение, получаемое с помощью потенциала Борна — Майера [13]:

$$E_e(\delta) = \frac{3A}{A_1\rho_0} \exp[A_1(1 - \delta^{-1/3})] + \frac{3K}{\rho_0} \delta^{1/3}, \quad (10)$$

где A, A_1, K — постоянные, связанные с параметрами, характеризующими материал, и подлежащие определению. Подобный вид зависимости $E_e(\delta)$ использован в [14] для построения аналогичного уравнения состояния металлов. Al_2O_3 можно считать ионным кристаллом, а как показано в [13], потенциалы металлов и ионных кристаллов совпадают по форме. Следствием (10) являются соотношения для холодного давления $p_e(\delta)$ и соответствующей объемной скорости звука $a_e(\delta)$ (модуля холодного объемного (всестороннего) сжатия $B_e(\delta)$):

$$\begin{aligned} p_e(\delta) &= \rho_0 \delta^2 \frac{\partial E_e(\delta)}{\partial \delta} = \\ &= A\delta^{2/3} \exp[A_1(1 - \delta^{-1/3})] - K\delta^{4/3}, \\ a_e^2(\delta) &= B_e(\delta) = \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p_e(\delta)}{\partial \delta} = \frac{2A}{3\rho_0} \delta^{-1/3} \times \\ &\times \left(1 + \frac{A_1}{2} \delta^{-1/3}\right) \exp[A_1(1 - \delta^{-1/3})] - \frac{4K}{3\rho_0} \delta^{1/3}. \end{aligned} \quad (11)$$

Вспомним теперь о представлении $E(\delta, D, S)$ в форме (9), где предположено, что $E_e = E_e(\delta, D)$. Отсюда имеем

$$\frac{\partial E_e(\delta, D)}{\partial D} = 2b^2(\delta), \quad (12)$$

где $b(\delta)$ — скорость распространения поперечных звуковых возмущений (поперечная скорость звука), причем

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_e(\delta, 0)}{\partial \delta} &= \frac{p_e(\delta, 0)}{\rho_0 \delta^2} = \frac{p_e(\delta)}{\rho_0 \delta^2}, \\ \frac{\partial p_e(\delta, 0)}{\partial \delta} &= \rho_0 B_e(\delta, 0) = \rho_0 B_e(\delta) = \frac{dp_e(\delta)}{d\delta}. \end{aligned}$$

Воспользовавшись соотношением (12), получаем

$$E_e(\delta, D) = E_e(\delta) + 2b^2(\delta)D, \quad (13)$$

т. е. для построения уравнения состояния в форме (9) необходимо знание зависимости $b(\delta)$. Поперечная скорость звука связана с объемной $a(\delta)$ и продольной скоростью $c(\delta)$ (скорость распространения продольных звуковых возмущений) соотношением

$$b^2(\delta) = 3[c^2(\delta) - a^2(\delta)]/4 \quad (14)$$

(известная связь между модулями Юнга, сдвига и всестороннего сжатия). При $\delta = 1$ пару базовых упругих модулей несложно определить экспериментально. Сложнее определить эти величины при $\delta > 1$. Известные методы измерения скоростей звука в веществе, сжатом ударной волной (методы догоняющей и боковой разгрузки), могут дать только неизотропические значения параметров. Квазистатические измерения сложны, требуют дорогостоящего оборудования и позволяют достичь в стандартных лабораторных условиях значений δ , не на много превосходящих единицу. В этой связи необходимо ориентироваться на теоретические подходы, в особенности — для определения зависимости $b(\delta)$. Проще всего, присоединив к (14) соотношение, связывающее дебаевскую температуру $\Theta(\delta)$ с $c(\delta)$ и $b(\delta)$ [13]:

$$\frac{1}{c^3} + \frac{2}{b^3} = \left(\frac{h}{k}\right)^3 \frac{18\pi^2 L\rho_0\nu}{\mu} \frac{\delta}{\Theta^3(\delta)} \quad (15)$$

и дополнив (14), (15) выражением (11) для $a(\delta)$ (здесь еще предстоит определить постоянные A, A_1 и K), получить замкнутую систему уравнений для вычисления $c(\delta)$ и $b(\delta)$. В (15) h — постоянная Планка, k — постоянная Больцмана, L — число Авогадро, μ — молярная масса, ν — число атомов в молекуле Al_2O_3 .

Зависимость дебаевской температуры от δ получим, воспользовавшись соотношениями для коэффициента Грюнайзена $\Gamma(\delta)$, для которого, с одной стороны, имеем [13]

$$\Gamma(\delta) = \frac{\partial \ln \Theta}{\partial \ln \delta},$$

а с другой стороны, по формуле Ландау — Слейтера

$$\Gamma(\delta) = \frac{V}{2} \frac{\partial^2 p_e(\delta)/\partial V^2}{\partial p_e(\delta)/\partial V} - \frac{2}{3}$$

(V — удельный объем). Из этих выражений получим

$$\Theta(\delta) = \Theta_0 \delta^{m+1/3} \sqrt{a^2(\delta)/a^2(1)}, \quad (16)$$

где

$$m = \bar{\Gamma}_0 - \frac{1}{6} \frac{A(A_1^2 + 2A_1 + 2) - 12K}{A(A_1 + 2) - 4K},$$

$$\Theta_0 = \Theta(1), \quad \Gamma_0 = \Gamma(1).$$

Аналогичные зависимости для $\Theta(\delta)$ можно получить, используя вместо формулы Ландау — Слейтера другие известные соотношения, связывающие коэффициент Грюнайзена с $p_e(\delta)$,

которые будут отличаться от приведенного выражением m через постоянные A, A_1, K .

При построении зависимости для тепловой составляющей энергии $E_T(\delta, S)$ основным является установление связи теплоемкости с параметрами, характеризующими колебания атомов (ионов) относительно положения равновесия. Здесь в первую очередь необходимо решить вопрос о функции распределения собственных частот колебаний. Наибольшее распространение получила теория Дебая [13], достаточно хорошо описывающая тепловые свойства твердых тел, в частности их теплоемкость, в широком диапазоне изменения температуры. Следуя этому подходу, будем считать, что

$$E_T(\delta, S) = \Theta(\delta)f(s), \quad (17)$$

где

$$s = \frac{T}{\Theta(\delta)}, \quad f(s) = \frac{3R\nu}{\mu} \left[\frac{3}{8} + sQ\left(\frac{1}{s}\right) \right],$$

$$Q(s) = \frac{3}{s^3} \int_0^s \frac{x^2 dx}{e^x - 1}, \quad S = \frac{1}{s} f(s) + \int \frac{f(s)}{s^2} ds.$$

Функция Дебая $Q(s)$ хорошо изучена; известны зависимости, приближающие Q в области высоких и низких температур [13]. Для интересующего нас класса задач можно считать, что температура не опускается намного ниже дебаевской, тогда

$$Q(s) \simeq 1 - \frac{3}{8}s + 0,05s^2,$$

откуда

$$f(s) = \frac{3R\nu}{\mu} s \left(1 + \frac{0,05}{s^2} \right),$$

$$S = \frac{3R\nu}{\mu} \left[\ln s + \frac{0,025}{s^2} \right] - S_0.$$

Здесь S_0 — значение энтропии в начальном состоянии. В этом случае

$$E_T(\delta, S) = \frac{3R\nu}{\mu} \left[s + \frac{0,05}{s} \right] \Theta(\delta). \quad (18)$$

Таким образом, полная энергия складывается из $E_e(\delta, D)$ и $E_T(\delta, S)$, причем в случае произвольной температуры E_T вычисляется по (17), а для условий динамического нагружения — по (18).

Обратимся теперь к определению постоянных A, A_1, K . Из условия равенства нулю давления при нормальных (начальных) условиях получаем связь K с A :

$$K = A + \Gamma_0 \rho_0 \Theta_0 \frac{3R\nu}{\mu} \left[s_0 + \frac{0,05}{s} \right], \quad s_0 = T_0/\Theta_0,$$

T_0 — начальная (комнатная) температура. Постоянные A, A_1 получаются, аналогично [13], из условия наилучшего совпадения расчетной ударной адиабаты с экспериментальной.

В проведенном построении при обращении к уравнению состояния для определения $a(\delta), b(\delta)$ необходимо каждый раз численно решать систему (14)–(16). Во избежание этой процедуры результаты предварительно проведенного численного решения были аппроксимированы степенными функциями методом наименьших квадратов:

$$a^2(\delta) = a_0^2 \delta^{n_1}, \quad b^2(\delta) = b_0^2 \delta^{n_2},$$

$$a_0 = a(1), \quad b_0 = b(1),$$

откуда $c^2(\delta) = a_0^2 \delta^{n_1} + b_0^2 \delta^{n_2}$ и $\Theta(\delta) = \Theta_0 \delta^{\Gamma_0}$.

Суммируя проделанные выкладки, окончательно получаем уравнение состояния при нешаровом тензоре деформации в виде

$$E(\delta, D, S) = \frac{a_0^2}{n_1(n_1+1)} (\delta^{n_1} - 1) +$$

$$+ \left(\frac{c_0^2}{n_1+1} + \frac{K-A}{\rho_0} \right) (\delta^{-1} - 1) + \frac{3(A/A_1 - K)}{\rho_0} +$$

$$+ 2b_0^2 \delta^{n_2} D + \frac{3R\nu}{\mu} \Theta_0 \delta^{\Gamma_0} \left(s + \frac{0,05}{s} \right), \quad (19)$$

$$S = \frac{3R\nu}{\mu} \left[\ln s + \frac{0,05}{s^2} \right] - S_0,$$

где $\rho_0 = 3,85$ г/см³, $a_0 = 7,63$ км/с, $b_0 = 6,25$ км/с, $\Theta_0 = 1000$ К, $\Gamma_0 = 1,6$, $\nu = 5$, $\mu = 102$ г/моль, $R = 0,0083$ (г·км²)/(с²·К·моль), $n_1 = 1,8$, $n_2 = 2,35$, $A = 276,45$ ГПа, $A_1 = 4,5$ ГПа, $K = 280$ ГПа.

ВРЕМЯ РЕЛАКСАЦИИ КАСАТЕЛЬНЫХ НАПРЯЖЕНИЙ

Время релаксации касательных напряжений характеризует трансформацию произвольного напряженного состояния в гидростатическое. Этот процесс происходит при любых уровнях нагрузки, в том числе и при напряжениях, меньших пределов текучести, определяемых в теории упругопластических тел (процессы ползучести). Процесс релаксации касательных напряжений является следствием эволюции дефектной структуры тел, в первую очередь — дислокационной. Это обстоятельство позволило связать время релаксации касательных напряжений с кинетикой дислокационного ансамбля [12]. Метод построения зависимости времени релаксации от параметров, характеризующих макроскопическое состояние среды,

апробирован на описании необратимого деформирования ряда металлов в условиях динамического нагружения [9, 10, 12].

Для построения обсуждаемой зависимости используется естественное предположение о том, что время релаксации пропорционально величине, обратной скорости необратимой деформации. Тогда, используя соотношение Орована, имеем

$$\tau = \alpha / \eta N v, \quad (20)$$

где η — модуль вектора Бюргерса; N , v — плотность подвижных дислокаций на единицу объема и их средняя скорость; α — еще подлежащий определению коэффициент пропорциональности. Следует отметить, что α и другие параметры, входящие в (20), зависят от температуры, что позволяет провести построение функции вида (4). Естественно, соотношение (20) не описывает всего многообразия микроструктурных и мезоструктурных механизмов релаксации касательных напряжений, но, как показывают многочисленные расчеты, дает хорошее описание динамических процессов в широком диапазоне изменения уровня нагрузок и температур [9, 10].

На основе анализа режимов движения и эволюции дислокационного ансамбля в [12] было решено остановиться на следующей форме зависимости Nv :

$$Nv = (N_0 + M\varepsilon)b_0 \exp \left[-\frac{\sigma_0 + M_1\varepsilon}{\sigma} \right],$$

где N_0 — начальная плотность подвижных дислокаций; M — коэффициент их размножения; M_1 — коэффициент деформационного упрочнения; σ_0 — характеристическое напряжение торможения; σ , ε — интенсивность касательных напряжений и деформаций. В рассматриваемом случае оказалось возможным ограничиться более простой формой зависимости, которая приводится к виду

$$\tau = \tau_0 \frac{\exp(\sigma_0/\sigma)}{N_0 + M\varepsilon}. \quad (21)$$

Как следует из определения постоянных (при фиксированной температуре), входящих в зависимость (21), они являются физическими величинами и, вообще говоря, могут быть найдены экспериментально. Реально это очень сложная экспериментальная проблема, и надежные результаты по определению параметров дислокационной кинетики получены лишь для отдельных материалов. Разработанная методика [12] позволяет находить эти параметры на основе

более просто получаемых и имеющихся в литературе экспериментальных данных о механических макроскопических характеристиках материалов. В первую очередь, это зависимости динамического предела текучести от скорости деформации. В основе метода — решение модельной задачи об одноосной однородной деформации тонкого стержня.

Пусть тонкий стержень с первоначальной длиной l_0 подвергается одноосной деформации в направлении его оси Or . Будем считать, что левый конец стержня закреплен в точке $r = r_0$, а правый перемещается с постоянной скоростью w_0 , т. е. координата правого конца

$$r_1(t) = l_0 + w_0 t.$$

Если деформация стержня однородна, скорость его точек линейно распределена по длине, т. е.

$$u(r, t) = w_0 \cdot r / r_1(t).$$

Отсюда скорость деформации e вычисляется по формуле

$$e = \frac{\partial u}{\partial r} = \frac{w_0}{r_1} = \frac{w_0}{l_0 + w_0 t}.$$

Предполагая деформации малыми (что обычно соответствует условиям экспериментов), имеем

$$\frac{\Delta l}{l_0} = \frac{w_0 t}{l_0} \ll 1,$$

откуда $e = w_0/l_0$. Так как предполагалось, что стержень тонкий, то в (5) $\sigma_2 \equiv \sigma_3$, а в силу симметричности задачи относительно оси r и ввиду изотропности материала имеем $h_2 \equiv h_3$. Вследствие уже сделанного предположения об однородности деформации все величины в (5) являются функциями только времени, поэтому в итоге система (5) для описания однородной одноосной деформации тонкого стержня принимает вид

$$\begin{aligned} \frac{dh_1}{dt} &= e - \frac{d_1}{\tau}, & \frac{dS}{dt} &= 4 \frac{b^2}{T} \frac{D}{\tau}, \\ \sigma_1 &= \rho \frac{\partial E}{\partial h_1}, & \sigma_2 &= \rho \frac{\partial E}{\partial h_2}, & \sigma_3 &= \rho \frac{\partial E}{\partial h_3}, \\ T &= \frac{\partial E}{\partial S}, & \sigma_2 &\equiv \sigma_3 \equiv 0, & h_2 &\equiv h_3, \\ \tau &= \tau_0 \frac{\exp(\sigma_0/\sigma)}{N_0 + M\varepsilon}, & E &= E(\delta, D, S), \end{aligned} \quad (22)$$

где для E используется выражение (19). В результате решения задачи (22) при заданных $e = \text{const}$ и начальных температурах T_0

рассчитывается $\sigma_1(\varepsilon_1)$ -диаграмма растяжения материала, которую можно сравнивать с соответствующей экспериментальной зависимостью. Значения параметров в (21) выбирались из условия наилучшего совпадения расчетных и экспериментальных $(\sigma_1-\varepsilon_1)$ -диаграмм. Качественно получаемые в расчетах зависимости $\sigma_1(\varepsilon_1)$ имеют вид, характерный для идеальной упругопластической среды. Имеется участок практически линейной связи между напряжением и деформацией и участок роста деформации при незначительном изменении напряжения. Это дает возможность сравнения результатов расчета с экспериментальной зависимостью предела текучести σ_T от ε , что позволяет сделать выбор параметров, обеспечивающий применимость модели в широком диапазоне изменения ε . Как показывают предыдущие исследования [12], достаточно выбрать в (21) только параметры τ_0 и σ_0 , задавшись известными из экспериментов средними значениями N_0 и M .

Дифференциальные уравнения, входящие в систему (22), вследствие наличия в правых частях резко меняющейся функции $\tau = \tau(\sigma, \varepsilon, T)$, представляют собой жесткую автономную систему обыкновенных дифференциальных уравнений. Применение явных методов решения таких систем типа методов Рунге — Кутты или Адамса затруднительно из-за сильного ограничения на шаг интегрирования во всем расчетном интервале, что вызвано требованием устойчивости численного решения. Для численного решения был использован апробированный ранее [12] метод переменного шага и порядка, построенный на основе A -устойчивых методов Розенброка. За искомые величины τ_0 и σ_0 принимались те их значения, которые доставляли минимум функции, определявшей сумму квадратов отклонений экспериментальных значений пределов текучести от расчетных. Минимум отыскивался с помощью метода градиентного спуска [12]. Численные эксперименты, в которых в физически реальном диапазоне менялись начальные значения отыскиваемых параметров, показали, что в такой области найденный минимум является единственным. Таким методом получены следующие значения параметров зависимости (21): $N_0 = 10^6 \text{ см}^{-2}$, $M = 10^{10} \text{ см}^{-2}$, $\tau_0 = 10^2 \text{ мкс} \cdot \text{см}^{-2}$, $\sigma_0 = 55 \text{ ГПа}$.

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Для апробации модели и проверки приме-

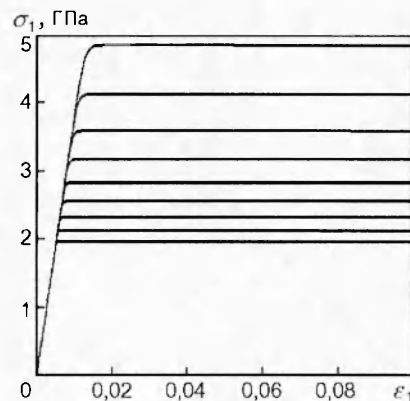


Рис. 1. Расчетные $(\sigma_1-\varepsilon_1)$ -диаграммы Al_2O_3 : горизонтальные участки кривых снизу вверх соответствуют значениям $\dot{\varepsilon} = 10^{-3}, 10^{-2}, \dots, 10^5 \text{ с}^{-1}$

нимости построенных соотношений (19), (20) был решен ряд задач динамического деформирования рассматриваемого материала. Выбор задач определялся возможностью качественного и количественного сравнения результатов расчетов с экспериментальными данными.

Задача об однородном сжатии тонкого стержня. Решение данной задачи, постановка которой обсуждалась выше, дает возможность судить о качественном характере обратимого и необратимого деформирования в наиболее простых условиях, к реализации которых чаще всего стремятся при экспериментальном исследовании механических свойств материалов. Математическая постановка задачи сводится к решению системы (22) с начальными данными $h_1(0) = 0$, $\sigma_1(0) = 0$, $T = T_0 = 293 \text{ К}$, $S = S_0$ при условии $\dot{\varepsilon} = \text{const}$. Результаты решения для значений $\dot{\varepsilon} = 10^{-3}, 10^{-2}, \dots, 10^5 \text{ с}^{-1}$ приведены на рис. 1 в виде зависимостей напряжения σ_1 от величины деформации стержня $\varepsilon_1 = \dot{\varepsilon}t$. Расчет проведен до $\varepsilon_1 = 10\%$, хотя из эксперимента известно, что разрушение материала, особенно при высоких скоростях деформации, происходит при меньших значениях ε_1 . Качественный вид полученных зависимостей, аналогичный виду расчетных зависимостей $h_1(t)$, близок к характерному для идеального упругопластического тела. Вычисленный по наклону начального участка модуль Юнга практически совпадает с известным из экспериментов.

Задача об ударно-волновом деформировании. При решении данной задачи выявляется способность модели описывать как макроскопические квазиравновесные особенности про-

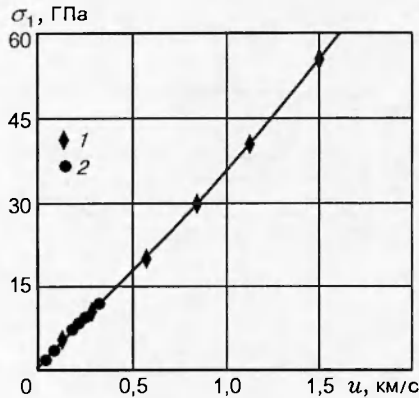


Рис. 2. Сравнение расчетной ударной адиабаты с экспериментальной:

1 — расчет, 2 — экспериментальные данные [15]

цессов на основе законов сохранения и соотношений равновесной термодинамики, так и более тонкие эффекты, связанные с неравновесными переходными состояниями во фронте реальных ударных волн, обладающих пространственной структурой. Простейшей среди ударно-волновых задач является задача о распространении плоской ударной волны, генерируемой движением поршня с заданной скоростью. При этом уже по ее решению можно судить о названных выше возможностях модели. Математически это соответствует решению системы (5) с начальными и граничными условиями:

$$t = 0, r > r_0: h_2(0, r) = h_3(0, r) = 0, u(0, r) = 0, \\ \rho(0, r) = \rho_0, T(0, r) = 293 \text{ K};$$

$$t > 0, r = r_0(t): u(t, r_0) = u_0.$$

Одной из возможностей сравнения результатов решения данной задачи с независимыми экспериментальными данными является сопоставление результата прямого расчета параметров вещества за фронтом ударной волны с известной ударной адиабатой вещества. Такое сопоставление проводится на рис. 2, где приведены рассчитанная упомянутым способом ударная адиабата и экспериментальные данные [15] в форме зависимости $\sigma_1(u)$. Сравнение показывает, что расчет хорошо описывает данные независимых экспериментов.

Одной из часто применяемых форм представления ударной адиабаты вещества является ее запись в виде соотношения, связывающего скорость ударной волны и массовую скорость за ее фронтом. Обычно для твердых тел

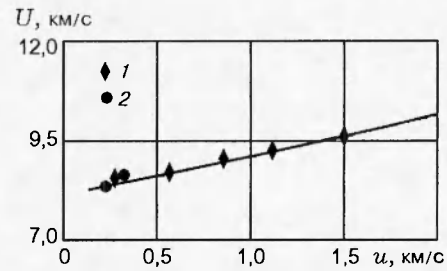


Рис. 3. Ударная адиабата в координатах (U, u) (обозначения те же, что и на рис. 2)

эти величины связаны линейной зависимостью. Рис. 3 показывает, что рассчитанная ударная адиабата действительно с хорошей точностью может быть представлена линейной функцией $U(u)$, где U — скорость распространения ударной волны:

$$U = 8,025 + 1,05u \quad (U, u \text{ в км/с}). \quad (23)$$

На рис. 4 показана эволюция профиля ударной волны по мере ее распространения в форме зависимости σ_1 от пространственной координаты в последовательные моменты времени. При данной амплитуде ударной волны происходит ее расщепление на упругий предвестник и пластическую волну — эффект, характерный для твердых тел, имеющих излом на ударной адиабате (см. рис. 2). Зона перехода от начального состояния (перед фронтом волны) к конечному (за фронтом) при распространении волны увеличивается, поэтому ударная волна не может считаться стационарной, хотя параметры вещества перед и за фронтом свя-

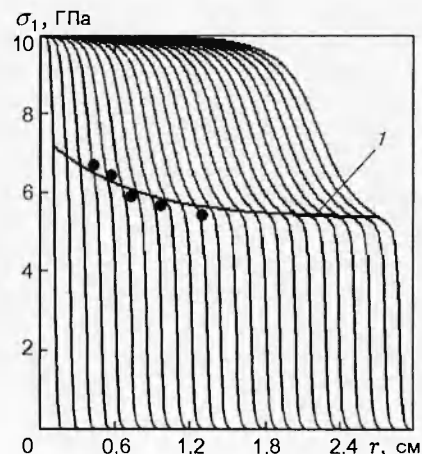


Рис. 4. Распространение ударной волны

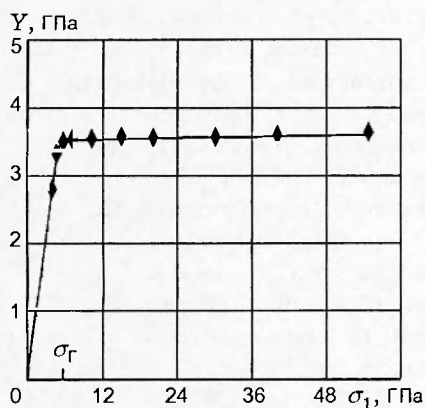


Рис. 5. Зависимость касательного напряжения за фронтом ударной волны от ее амплитуды (σ_G — упругий предел Гюгонио)

заны ударной адиабатой, построенной в предположении стационарности ударного перехода. Рассчитанная скорость распространения упругого предвестника, вычисленная по перемещению точек профиля на уровне половины его амплитуды, практически совпадает с продольной скоростью звука. Расчетная скорость пластической волны, определяющаяся как скорость перемещения точек перегиба на верхнем участке профиля волны, близка к объемной скорости звука. Эта скорость принимается за скорость ударной волны в формуле (23), когда волна имеет двухволновую конфигурацию.

Расчет также хорошо передает эволюцию упругого предвестника от момента его выделения после начала распада разрыва до выхода на стационарное значение, величина которого соответствует упругому пределу Гюгонио. Кривая 1 на рис. 4 показывает затухание и выход на стационарное значение амплитуды упругого предвестника. Она проведена по точкам, в которых достигается минимум скорости деформации, точки — экспериментальные данные о затухании упругого предвестника из [3]. Проведенное сравнение показывает, что модель вполне точно описывает весь процесс эволюции упругого предвестника.

Одной из механических характеристик поведения веществ при ударно-волновом сжатии является касательное напряжение в сжатом веществе Y . В моделях упругопластического тела оно отождествляется с пределом текучести. Рис. 5 демонстрирует рассчитанные значения $Y = (\sigma_1 - \sigma_2)/2$ в зависимости от амплитуды ударной волны. Начальный участок приведен-

ной кривой соответствует упругому сжатию до предела Гюгонио. Расчет показывает, что с ростом амплитуды сжатия выше предела Гюгонио предел текучести в исследуемом материале незначительно возрастает. Аналогичный результат экспериментально получен в [16].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе показано, что модель вязкоупругого тела максвелловского типа, ранее использовавшаяся для расчетов динамического деформирования металлов, применима и для описания аналогичных процессов в керамических материалах. Построено уравнение состояния керамики Al_2O_3 в виде зависимости упругой энергии при нешаровом тензоре деформаций и зависимости времени релаксации касательных напряжений от параметров состояния среды. Несмотря на различия в типах связи металлов и керамик, из-за формального сходства потенциалов межатомного взаимодействия упругие (холодные) составляющие уравнения состояния в обоих материалах имеют одинаковый функциональный вид. Применимость построенной модели для описания динамического и ударно-волнового деформирования керамических материалов на примере керамики Al_2O_3 подтверждена сравнением результатов расчетов с независимыми экспериментальными данными.

Автор благодарен А. В. Тягельскому за помощь в проведении численных расчетов.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки РФ (код проекта 08.02.03 ГНТП «Новые материалы»).

ЛИТЕРАТУРА

1. **Dandekar D. P.** Response of ceramics under shock-wave loading // High-Pressure Science and Technology — 1993. AIP Conf. Proc., 1994. Pt 1. P. 729–732.
2. **Grady D. E.** Impact strength and indentation hardness of high-strength ceramics // High-Pressure Science and Technology — 1993. AIP Conf. Proc., 1994. Pt 1. P. 741–744.
3. **Murray N. H., Bourne N. K., Rozenberg Z.** Precursor decay in several aluminas // Shock Compression of Condensed Matter — 1995. AIP Conf. Proc., 1996. Pt 1. P. 491–494.
4. **Steinberg D. J.** Computer studies of the dynamic strength of ceramics // J. de Physique IV. 1991. T. 1. P. 837–844.

5. **Rajendran A. M.** Modeling the shock response of AD995 alumina // High-Pressure Science and Technology — 1993. AIP Conf. Proc., 1994. Pt 1. P. 725–728.
6. **Фомин В. М., Хакимов Э. М.** Численное моделирование волн сжатия и разрежения в металлах // ПМТФ. 1979. № 5. С. 114–122.
7. **Мержиевский Л. А., Реснянский А. Д.** О выборе модели для описания затухания ударных волн в металлах // Физика горения и взрыва. 1983. Т. 19, № 1. С. 99–105.
8. **Быченков В. А., Свидинский В. А.** Не корректность модели упругопластического течения в методе Уилкинса // Физика горения и взрыва. 1990. Т. 26, № 1. С. 118–122.
9. **Мержиевский Л. А., Реснянский А. Д.** Численное моделирование деформирования и разрушения пологой конической облицовки // Физика горения и взрыва. 1987. Т. 23, № 2. С. 102–110.
10. **Мержиевский Л. А., Реснянский А. Д.** Численное моделирование ударно-волновых процессов в металлах // Физика горения и взрыва. 1984. Т. 20, № 5. С. 114–122.
11. **Годунов С. К.** Элементы механики сплошной среды. М.: Наука, 1978.
12. **Мержиевский Л. А., Шамонин С. А.** Построение зависимости времени релаксации касательных напряжений от параметров состояния среды // ПМТФ. 1980. № 5. С. 170–179.
13. **Жарков В. Н., Калинин В. А.** Уравнения состояния твердых тел при высоких давлениях и температурах. М.: Наука, 1968.
14. **Годунов С. К., Козин Н. С., Роменский Е. И.** Уравнение состояния упругой энергии металлов при нешаровом тензоре деформаций // ПМТФ. 1974. № 2. С. 123–128.
15. **Dandekar D. P., Bartkowski P.** Shock response of AD995 alumina // High-Pressure Science and Technology — 1993. AIP Conf. Proc., 1994. Pt 1. P. 733–736.
16. **Rozenberg Z., Yaziv D., Yeshurun Y., Bless S. J.** Shear strength of shock-loaded alumina as determined with longitudinal and transverse manganin gauges // J. Appl. Phys. 1987. N 3. P. 1120–1122.

Поступила в редакцию 10/VII 1998 г.