

**На правах рукописи**

**СМОЛЯКОВ Андрей Анатольевич**

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ПОЛУЧЕНИЯ  
НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ В МЕТАЛЛАХ  
С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ  
РАВНОКАНАЛЬНОГО УГЛОВОГО ПРЕССОВАНИЯ**

**Специальность 05.13.18 – Математическое моделирование,  
численные методы и комплексы программ**

**АВТОРЕФЕРАТ**  
**диссертации на соискание ученой степени**  
**кандидата технических наук**

**Уфа 2007**

Работа выполнена в Институте теоретической и математической физики  
при Российском федеральном ядерном центре – Всероссийском научно-  
исследовательском институте экспериментальной физики

(РФЯЦ – ВНИИЭФ), г.Саров

Научный руководитель	д-р физ.-мат. наук <b>СОЛОВЬЕВ Вячеслав Петрович</b>
Официальные оппоненты	д-р физ.-мат. наук, проф. <b>ЖИТНИКОВ Владимир Павлович</b>  канд. физ.-мат. наук <b>ЗАРИПОВ Дамир Мунзирович</b>
Ведущая организация	<b>Нижегородский филиал института машиноведения РАН</b>

Защита состоится «18» мая 2007 г. в 10.00 часов  
на заседании диссертационного совета Д 212.288.03  
при Уфимском государственном авиационном техническом университете  
по адресу: 450000, Уфа, ул. К. Маркса 12

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке УГАТУ

Автореферат разослан «18» апреля 2007 г.

Ученый секретарь дис-  
сертационного совета,  
д-р техн. наук, проф.

Миронов В.В.

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

**Актуальность проблемы.** За последние десятилетие наблюдается значительный интерес к получению материалов с помощью различных методов интенсивной пластической деформации (ИПД). Посредством таких методов можно произвести значительное измельчение микроструктуры металлов и сплавов до наноразмеров, когда средний размер зерна будет измеряться десятками нанометров. Объемные наноструктурированные материалы, полученные методами ИПД, характеризуются уникальными физико-механическими свойствами, например, высокой прочностью при сохранении достаточной пластичности.

Анализ структурообразования при равноканальном угловом прессовании (РКУП) представляется исключительно сложным с точки зрения его описания методами моделирования, поскольку механическое поведение материалов при ИПД является неочевидным многофакторным процессом. Поэтому для успешного решения поставленной задачи необходимо соединить возможности компьютерного моделирования на разных (макро-, микро-, мезо-) уровнях и, основываясь на физическом понимании происходящих при ИПД процессов, описать эволюцию структурных параметров ИПД материалов в зависимости от параметров ИПД и режимов РКУП. На макроуровне возможно описание поведения материала при заданной схеме деформации в зависимости от её параметров. На мезоуровне может быть получена информация о взаимосвязи формирующейся структуры и свойств получаемых материалов. Исследования на микроуровне позволяют понять физическую природу особенностей протекающих процессов.

Несмотря на значительные исследования, выполненные отечественными и зарубежными учеными по изучению свойств объемных наноматериалов, остается острой проблема исследования напряженно-деформированного состояния в объемных наноматериалах, полученных при РКУП, знание которого позволит оптимизировать процесс интенсивной пластической деформации, получать заготовки наноматериалов с равномерным распределением полей пластических деформаций по объему и учитывать историю нагружения при многопроходности исследуемого процесса.

Решение задачи о моделировании процесса РКУП требует от используемой численной методики корректного описания следующих процессов:

- существенное формоизменение образца, приводящее к реализации высокого уровня деформаций при его значительных смещениях;
- контактное взаимодействие образца со стенками канала прессования сменной вставки с учетом трения;
- распространение температуры и ее влияние на механические свойства используемых материалов образца и вставки.

Для учета влияния структуры вещества на его механические характеристики необходимо, чтобы используемая численная методика позволяла внедрять соответствующие модели.

**Цель работы.** Целью работы является разработка основ моделирования процесса получения объемной нанокристаллической структуры в металлах при высоких интенсивных деформациях методом РКУП, включающей метод формирова-

ния дифференциальных уравнений равновесия, метод численного решения этих уравнений, математические модели состояния материалов, сравнительный анализ результатов численного моделирования с экспериментом.

**Исходя из цели работы, для ее реализации были поставлены и решены следующие задачи:**

1. Разработать методику моделирования трехмерного процесса низкоскоростного деформирования среды при высоких интенсивных деформациях с учетом контактного взаимодействия.

2. Провести расчетно-теоретические исследования процесса РКУП. Определить основные факторы, влияющие на характер данного процесса.

3. Сопоставить результаты расчетного анализа с экспериментальными данными. Определить, как с помощью численного расчета возможно предсказать новые свойства материала, полученные в процессе РКУП.

4. Найти оптимальные параметры установки РКУП, при которых достигается равномерность поля деформаций по сечению заготовки.

**Научная новизна работы** заключается в следующем:

1. На основе вариационно-разностной схемы решения задач динамики создана методика, обеспечивающая определение полей пластических деформаций в условиях низких скоростей деформации и больших уровней напряжений моделирование в трехмерной постановке с использованием уравнений механики сплошной среды в лагранжевых переменных процессов динамического деформирования системы твердых тел с учетом контактного взаимодействия элементов рассматриваемой системы и перестройки в ходе расчета разностной сетки в случае ее большого искажения;

2. Получены результаты численных исследований процесса РКУП, которые позволили расширить знания об изучаемом процессе. Результаты показали, что:

— в рамках простейшей изотропной модели поведения материала возможно качественное предсказание структуры материала, прошедшего обработку ИПД. возможна оценка однородности структуры – накопленной пластической деформации как основного критерия измельчения материала;

— конструктивные параметры процесса РКУП и внешние факторы (трение, скорость перемещения пуансона и т.д.) оказывают существенное влияние на характер распределения накопленной пластической деформации, и, как следствие, от них напрямую зависит однородность структуры материала после процесса РКУП;

— процесс оптимизации параметров установки для РКУП возможен только путем моделирования, без проведения промежуточных дорогостоящих экспериментов. Выработаны рекомендации по геометрическим параметрам каналов оснастки, когда достигается равномерность накопленной пластической деформации по объему заготовки.

3. Разработаны феноменологические модели, позволяющие описывать поведение материала в процессе РКУП, причем модели учитывают изменение свойств вещества от прохода к проходу.

**Методы исследований** основаны на использовании:

- систем уравнений, определяющих процесс нестационарного деформирования среды, сформулированных в переменных Лагранжа;
- вариационно-разностных численных методов решения задач динамики деформирования твердого тела;
- анализа экспериментальных данных, позволяющих исследовать тепловое деформирование, пластичность и разрушение металлов при произвольных законах изменения температуры, скорости деформирования и размеров канала.

**Достоверность** научных положений, результатов и выводов, содержащихся в диссертационной работе, основывается на фундаментальных положениях, современных экспериментальных и численных методах динамики деформирования твердого тела и подтверждается:

- математическим и экспериментальным обоснованием ряда принимаемых положений при формулировке разрешающей системы уравнений и численного метода;
- решением большого числа тестовых задач;
- сравнением получаемых решений с известными и экспериментальными результатами.

**Практическая ценность работы.** Разработанная численная методика использовалась как для расчетно-теоретических и экспериментальных исследований процесса РКУП, так и при решении различных прикладных задач динамики твердого тела (ударно-волновые процессы, задачи высокоскоростного соударения, внедрения, пробития и т.д.), решаемых в соответствии с основной тематикой РФЯЦ-ВНИИЭФ.

Численные результаты исследований изменений структуры твердых тел в процессе РКУП, полученные автором, а так же разработанные феноменологические модели сдвиговой прочности для меди и титана применялись при определении энергосиловых и конструктивных параметров РКУП.

Показано, что эксперименты с образцами, прошедшими обработку РКУП, могут быть использованы для определения сдвиговой прочности конкретных материалов и дальнейшего построения соответствующих математических моделей, что позволяет изучать прочностные характеристики конструкционных материалов при малых скоростях деформаций  $\dot{\varepsilon} \sim 10^{-1} \div 10^0 \text{C}^{-1}$  и больших сжатиях в условиях нагружения всесторонним давлением до уровня  $P \sim 1$  ГПа, т.е. в области нагружений, в которой экспериментальных методов крайне мало.

**Автором выносятся на защиту:**

1. Численная методика, позволяющая в трехмерном приближении описывать процессы интенсивного деформирования сплошной среды в области низких скоростей деформаций и больших уровней напряжений с учетом контактного взаимодействия.

Методика базируется на уравнениях механики сплошных сред и вариационно-разностном методе решения.

Алгоритм перестройки разностной сетки позволяет моделировать процессы деформирования сложных систем с существенным формоизменением расчетной области.

Корректность методики проверена на основе сравнения численного решения с известными аналитическими и экспериментальными данными.

2. Результаты расчетно-теоретических исследований, которые показали, что моделирование процесса РКУП на макроуровне позволяет удовлетворительно описывать напряженно-деформированное состояние, присущее ИПД. Выявлены основные факторы, влияющие на формирование равномерного поля пластических деформаций, таких как:

- трение заготовки о поверхность оснастки;
- геометрия зоны пересечения каналов;
- количество проходов;
- маршрут прессования.

3. Сравнительный анализ теоретических результатов с экспериментальными данными показал возможность разработанной методики для корректного описания процессов, происходящих в заготовке после РКУП. Также выявлена возможность предсказания характера распределения новых характеристик обрабатываемого материала – твердости, прочности и т.п..

**Апробация работы.** Основные результаты работы докладывались на следующих конференциях и семинарах: 7<sup>th</sup> International Conference on Nanostructured Materials June 20–24, 2004, Wiesbaden/Germany; Международная научно-практическая конференция по перспективным композиционным материалам: "НАНОКОМПОЗИТЫ-2004" 27 сентября – 01 октября 2004 года Россия, Краснодарский край, г. Сочи; NATO Advanced Research Workshop (ARW) "Nanostructured Materials by High-Pressure Severe Plastic Deformation", Donetsk, Ukraine, September 22-26, 2004; конференция в Университете г. Метц, Франция; ICOTOM 14, Belgium; Международная научно-практическая конференция материаловедческих обществ России: "Создание материалов с заданными свойствами: Методология и Моделирование" 22 – 26 ноября 2004 года Россия, Московская обл, Ершово; TMS 2005 134<sup>th</sup> Annual Meeting & Exhibition February 13 – 17, 2005 San Francisco California USA; Семинар, посвященный 10-летию ИФПМ. 11 – 14 мая 2005 г., г.Уфа, Россия; 2<sup>nd</sup> International Conference "Nanomaterials and Nanotechnologies" (Crete, Greece, June 14-18, 2005); 3<sup>rd</sup> International Conference on Nanomaterials by Severe Plastic Deformation (NanoSPD 3) September 22 -26, 2005 Fukuola Japan; TMS 2006 135<sup>th</sup> Annual Meeting & Exhibition March 13 – 17, 2006 San Antonio Texas USA; NATO Advanced Research Workshop (ARW) "Nanostructured Materials by High-Pressure Severe Plastic Deformation", Sudak, Ukraine, September 17-22, 2006; TMS 2007 136<sup>th</sup> Annual Meeting & Exhibition February 25 - March 1, 2007 Orlando Florida USA.

**Публикации.** Основные результаты диссертации отражены в 15 печатных работах и в одном патенте на изобретение.

**Структура и объем диссертации.** Диссертация состоит из введения, пяти глав, основных выводов, списка литературы. Содержит 140 страниц машинопис-

ного текста, включающего 45 рисунков, 10 таблиц и библиографический список из 120 наименований.

## СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

**Во введении** обоснована актуальность темы диссертации, сформулированы цель, направления исследований и основные научные положения, выносимые на защиту, научная новизна, достоверность и практическая значимость работы.

**В первой главе** выполнен анализ опубликованных работ в области получения объемных наноматериалов при различных сочетаниях методов интенсивной пластической деформации (ИПД).

В последнее десятилетие большое внимание специалистов, занимающихся созданием и исследованием новых материалов, - материаловедов, механиков, физиков – вызвали объемные наноматериалы. Полученные в результате ИПД объемные наноматериалы характеризуются чрезвычайно привлекательными свойствами. Особое место среди них занимают механические свойства. Так, например, в результате ИПД прочность может возрасти в 2–3 раза по сравнению с исходным состоянием. При этом пластичность не уменьшается, что обычно наблюдается в случае металлических материалов, подвергнутых большим пластическим деформациям. Выявлены изменения фундаментальных, обычно структурно-нечувствительных характеристик в наноструктурных материалах, полученных ИПД, такие как упругие модули, температуры Кюри и Дебая, намагниченность насыщения, процессы диффузии и др.

Установлено, что к настоящему времени экспериментально изучены механические свойства объемных наноматериалов, полученных при равноканальном угловом прессовании (РКУП), который является привлекательным и самым распространенным методом получения объемных наноматериалов.

Выявлено, что при экспериментальном изучении текстуры наноматериалов, полученных при РКУП, наблюдается неоднородность пластических деформаций по объему заготовки, которая зависит от энергосиловых и конструктивных параметров технологического оборудования для РКУП. Также выяснено, что определение напряженно-деформированного состояния в наноматериалах проведено при макромоделировании на плоских моделях из чистой меди. Однако неоднородность в текстуре требует теоретического моделирования РКУП – это многопараметрического процесса с учетом всех этапов современной методологии исследования сложных процессов в объемных моделях для более глубокого понимания связи изменения структуры с зоной пластической деформации в различных точках образца с учетом истории нагружения при его многопроходном прессовании.

На основании выполненного обзора научно-технической информации сформулированы цель и направление исследований.

**Во второй главе** изложены основные положения численной методики и результаты ее тестирования. В основу методики положены уравнения механики сплошной среды и вариационно-разностный метод решения. Основное уравнение для трехмерного случая имеет вид

$$\int_V \delta \dot{\varepsilon}^T C \sigma dV + \int_V \rho \delta \dot{u}^T \ddot{u} dV - \int_{\Omega} \delta \dot{u}^T p d\Omega = 0, \quad C = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где  $V$  – объем многогранного элемента в декартовой системе координат  $\{X, Y, Z\}$ ,  $\Omega$  – поверхность элемента  $V$ , на которой задана распределенная нагрузка;  $\varepsilon = [\varepsilon_{xx}, \varepsilon_{yy}, \varepsilon_{zz}, \varepsilon_{xy}, \varepsilon_{yz}, \varepsilon_{xz}]^T$ ,  $\sigma = [\sigma_{xx}, \sigma_{yy}, \sigma_{zz}, \sigma_{xy}, \sigma_{yz}, \sigma_{xz}]^T$  – векторы, составленные из компонент тензоров деформаций и напряжений;  $u = [u_x, u_y, u_z]^T$  – вектор перемещений;  $p = [p_x, p_y, p_z]^T$  – вектор распределенной нагрузки;  $\rho$  – плотность материала;

Точка над индексом означает дифференцирование по времени, буква “Т” – транспонирование.

Численное решение строится на трехмерной восьмиугольной разностной сетке. Для исключения искажения разностной сетки используется подход, суть которого состоит в рассмотрении наряду с восьмиугольными элементами шестиугольных (призма), пятиугольных (пирамида), и четырехугольных (тетраэдр) элементов “пониженной” жесткости.

Дискретизация определяющей системы уравнений основана на “естественной” аппроксимации частных производных по пространственным переменным. Формулы “естественной” аппроксимации градиента скалярной функции  $\varphi$  вытекают из теоремы о градиенте и теоремы о среднем:

$$\nabla \varphi = \lim_{V \rightarrow 0} \frac{1}{V} \int_{\eta} \varphi ds; \quad \nabla = [\partial_x, \partial_y, \partial_z]^T; \quad ds = [ds_x, ds_y, ds_z]^T \quad (2)$$

где  $\eta$  – граница элемента с объемом  $V$ ;  $ds_i$  – проекция вектора нормали малого участка грани на  $i$  координатную ось, умноженная на площадь  $ds$  данного малого участка.

Определяя значение функции в центре грани счетного элемента как среднеарифметическое ее значений в соответствующих вершинах, из (2) получаем формулу для приближенного вычисления  $\nabla \varphi$

$$\nabla \varphi = \tilde{V}^{-1} S \Phi; \quad \tilde{V} = 6V; \quad \Phi = [\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_N]^T \quad (3)$$

$$\text{здесь } S = \begin{bmatrix} S_x^1 & S_x^2 & \dots & S_x^N \\ S_y^1 & S_y^2 & \dots & S_y^N \\ S_z^1 & S_z^2 & \dots & S_z^N \end{bmatrix}, \quad (4)$$

$S_i^j = \sum_{j=1}^9 S^j \cdot (\bar{n}i)$ , где  $S^j$  – площадь соответствующего треугольника, имеющего своей

вершиной вершину  $j$ .  $\Phi = [\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_N]^T$  – вектор узловых значений функции;  $N$  – количество вершин в ячейке.

С использованием (3) соотношения Коши для  $N$ -угольной ячейки с номером  $l$  запишутся в виде

$$\dot{\varepsilon}_l = \tilde{V}^{-1} B_l \dot{U}_l, \quad (5)$$

где  $B_l = [b_{1l}, b_{2l}, \dots, b_{Nl}]$  – матрица разностного аналога дифференциального оператора;  $\dot{U}_l = [\dot{u}_1, \dot{u}_2, \dots, \dot{u}_N]^T$  – вектор скоростей вершин ячейки. Элементы матрицы  $B_l$  и вектора  $\dot{U}_l$  имеют вид

$$b_{jl} = \begin{bmatrix} S_x^j & 0 & 0 \\ 0 & S_y^j & 0 \\ 0 & 0 & S_z^j \\ 0.5S_y^j & 0.5S_x^j & 0 \\ 0 & 0.5S_z^j & 0.5S_y^j \\ 0.5S_z^j & 0 & 0.5S_x^j \end{bmatrix}, \quad (6)$$

$$\dot{u}_j = [\dot{u}_{xj}, \dot{u}_{yj}, \dot{u}_{zj}]^T. \quad (7)$$

Для постоянных в ячейке  $l$  напряжений  $\sigma_l$  первое слагаемое в (1) с учетом (5) выражается через  $\delta\dot{U}_l$  по формуле

$$\int_{V_l} \delta \dot{\varepsilon}^T C \sigma dV = \delta \dot{U}_l^T B_l^T C \sigma_l / 6 = -\delta \dot{U}_l^T F_l. \quad (8)$$

Применяя для второго и третьего слагаемых в (1) теорему о среднем, получим

$$\int_{V_l} \delta \dot{u}^T \rho \ddot{u} dV = \delta \dot{U}_l^T \rho V_l \ddot{U}_l / N = \delta \dot{U}_l^T m \ddot{U}_l, \quad (9)$$

$$\int_S \delta \dot{u}^T p ds = \delta \dot{U}_l^T Q_l. \quad (10)$$

В (9), (10)  $m$  – часть массы ячейки, приходящаяся на одну ее вершину;  $Q_l = [q_1, q_2, \dots, q_N]$  – вектор узловых сил.

Вводя сплошную нумерацию узлов разностной сетки и суммируя выражения (9)–(10) по всем ячейкам, получим

$$\delta \dot{U}^T (M \ddot{U} - F - Q) = 0, \quad (11)$$

где  $M$  – диагональная матрица масс, получающаяся распределением масс ячеек по узлам разностной сетки.

Из (11), ввиду произвольности  $\delta \dot{U}$ , вытекает система обыкновенных дифференциальных уравнений

$$M \ddot{U} = F + Q, \quad (12)$$

которая является разностным аналогом уравнения (1). Для вычисления производных по времени используется явная двухшаговая схема типа “крест” со вторым порядком точности. Величина шага по времени определяется из условия устойчивости Куранта.

Расчет контактного взаимодействия в численной методике осуществляется на несогласованных разностных сетках, что позволяет описывать процессы деформирования среды при любых относительных смещениях контактных границ. На поверхностях контакта твердых тел могут учитываться следующие условия: отрыв, проскальзывание с учетом трения и жесткая связь. Они формулируются как условие непроникания на тех участках поверхностей, которые находятся в данный момент в контакте, и условий свободных границ на остальных участках.

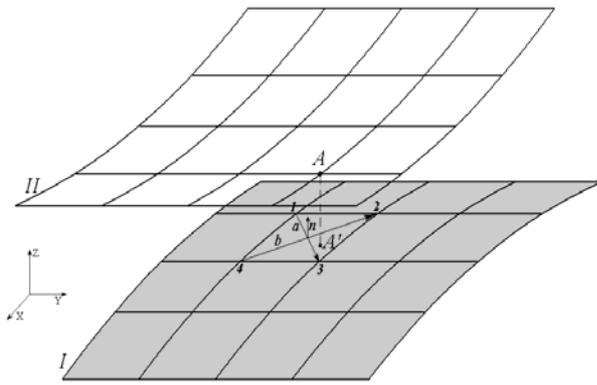


Рисунок 1. Схема расчета контакта

Вычисление контактных усилий осуществляется в два этапа.

На первом этапе поверхность  $I$  (рис. 1) принимается в качестве основной. Поверхность  $II$  при этом рассматривается как дискретный набор узлов разностной сетки. Для каждого узла, принадлежащего поверхности  $II$ , определяется парная ему ячейка на поверхности  $I$ , на которой лежит его проекция, построенная по нормали к поверхности  $I$ . Нормаль  $\vec{n} = (n_x, n_y, n_z)$  к поверхности  $I$  для каждой счетной ячейки определяется по векторному произведению векторов, построенных на диагоналях ячейки  $\vec{n} = \frac{[\vec{a} \ \vec{b}]}{|[\vec{a} \ \vec{b}]|}$ . В качестве расстояния от узла  $A$  до поверхности  $I$

принимается расстояние от узла  $A$  до плоскости с нормалью  $n$  и проходящей через точку с координатами, определяемыми как среднее арифметическое значение координат вершин счетной ячейки.

Условием вступления в контакт узла  $A$  является его сближение с поверхностью  $I$

$$\Delta \leq 0, \quad \Delta = (A'A \cdot \vec{n}).$$

При выполнении условия  $\Delta \leq 0$ , вычисляется контактное усилие

$$F_n = \Delta M_A M_{A'} [(M_A + M_{A'}) \Delta t^2]^{-1},$$

$\Delta t$  - шаг интегрирования,  $M_A, M_{A'}$  - соответственно массы узла  $A$  и фиктивного узла  $A'$ , построенного в точке проекции узла  $A$ .

$M_{A'}$  определяется по значениям масс вершин  $M_i$  счетной ячейки в соответствии с их весовыми коэффициентами  $\beta_i$ .

$$M_{A'} = \sum_{i=1}^4 \beta_i M_i, \quad \beta_i = (\beta_o r_i)^{-1}, \quad i = 1..4, \quad \beta_o = \sum_{i=1}^4 (r_i)^{-1}.$$

Здесь  $r_i$  расстояние от соответствующей вершины ячейки до фиктивного узла, равное проекции вектора, соединяющего вершину ячейки с фиктивным узлом, на плоскость с нормалью  $n$ .

Дополнительные усилия, обусловленные контактным взаимодействием, составляют: для узла  $A$ :  $\vec{F}_A = -F_n \cdot \vec{n}$ , для вершин парной ему ячейки:  $\vec{F}_i = -\beta_i \cdot \vec{F}_A, i=1..4$ .

Для вычисления силы трения на первом этапе для узлов  $A$  и  $A'$  определяются их скорости  $\vec{V}_A, \vec{V}_{A'}$  без учета контактного взаимодействия. Скорость фиктивного узла  $A'$ , определяется по алгоритму, аналогичному вычислению его массы:

$$\vec{V}_{A'} = \sum_{i=1}^4 \beta_i \vec{V}_i$$

Затем вычисляются составляющие скорости в плоскости грани ячейки

$$\Delta \vec{V}_\tau = \Delta \vec{V} - (\Delta \vec{V} \cdot \vec{n}) \cdot \vec{n}, \quad \Delta \vec{V} = \vec{V}_A - \vec{V}_{A'}$$

Искомая сила трения в соответствующих узлах составляет

$$\vec{F}_A^{fr} = -\frac{\Delta \vec{V}_\tau}{|\Delta \vec{V}_\tau|} \cdot F^*, \quad \vec{F}_{A'}^{fr} = -\vec{F}_A^{fr}.$$

При использовании модели кулоновского трения с коэффициентом  $\mu$

$$F^* = \min(\mu \cdot F_n, F_{A_{\max}}^{fr}), \quad F_{A_{\max}}^{fr} = \frac{M_A \cdot M_{A'}}{M_A + M_{A'}} \cdot \frac{|\Delta \vec{V}_\tau|}{\Delta t}.$$

На втором этапе поверхности *I* и *II* меняются местами. Результирующие значения контактных усилий определяются как полусумма соответствующих величин, полученных на первом и втором этапах расчета задачи контактного взаимодействия, и добавляются в узловые силы при вычислении.

При моделировании процессов с существенным формоизменением разностной сетки в ходе расчета проводится ее перестройка. Перестройка заключается в переинтерполяции счетных величин со старой сетки на новую. При этом обеспечивается сохранение массы, внутренней энергии и импульса.

Апробация численной методики применительно к исследованию процесса РКУП (сильного деформирования вещества с применением ИПД) проведена на основе моделирования экспериментов, проводившихся на протяжении нескольких лет во ВНИИЭФ, где были созданы лабораторные установки с различными конфигурациями каналов (горизонтального и вертикального) и зон их пересечения.

Возможности численной методики также проиллюстрированы на примерах решения некоторых прикладных задач, таких как: численное моделирование экспериментов по определению динамических характеристик материалов методом Тейлора; описание процессов осесимметричной потери устойчивости цилиндрических оболочек, в которых контур области контактирует с самим собой и т.д.. Хорошее согласие численных и экспериментальных результатов показывает корректность численной методики при решении достаточно широкого класса динамических задач.

**В третьей главе** описан подход к построению физической и математической моделей процесса РКУП. Численное моделирование невозможно без корректного и обоснованного выбора топологии расчетной сетки, экспериментально обоснованной модели поведения материала, физически правильного подхода к описанию трения.

В расчетах состояние вещества описывалось в рамках простейшей модели изотропного деформирования. Связь шаровой составляющей тензоров деформаций и напряжений осуществлялась с использованием уравнения состояния вещества в форме Ми-Грюнайзена

$$P = P_x + P_T = \frac{\rho_0 C_0^2}{n} (\eta^n - 1) + \Gamma \rho E_T, \quad E_T = E - E_x, \quad \eta = \frac{\rho}{\rho_0}, \quad (13)$$

где  $\rho_0$  – начальная плотность;  $C_0$  – начальная объемная скорость звука;  $\Gamma$  – коэффициент Грюнайзена, который принимался постоянным;  $E_x$ ,  $E_T$  – соответственно, холодная и тепловая составляющие удельной (на единицу массы) внутренней энергии  $E$ . Выражение для упругой составляющей внутренней энергии имело вид

$$E_x = \int P_x \frac{d\eta}{\eta^2}. \quad (14)$$

В начальный момент времени полагалось, что давление и внутренняя энергия равны нулю. Компоненты дивергента тензора напряжений определялись в рамках

дифференциальной теории термопластичности с изотропным упрочнением. При этом, модуль сдвига  $G$  вычислялся по формуле

$$G = \frac{3(1-2\nu)}{2(1+\nu)} \rho C_B^2, \quad (15)$$

где  $C_B^2 = \left( \frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_s$  – объемная скорость звука в сжатом состоянии.

Так как методика изначально рассчитана на процессы с высокими скоростями нагружения, временной масштаб для медленного процесса, к каким относится и РКУП, требует аргументированного подбора, обоснованного расчетной проверкой сходимости и устойчивости решения.

Структурообразование, происходящее в заготовке при РКУП, зависит от многих факторов, характеризующих процесс. В первую очередь это направление и число проходов образца сквозь каналы. Также существенную роль, в основном для равномерности по сечению новых характеристик материала, играет трение заготовки о стенки оснастки, геометрия зоны пересечения каналов и другие факторы, например противодействие, промежуточный выталкивающий материал и т.д.. Корректный учет всех этих факторов важен при построении расчетной схемы и закона поведения материалов.

На этапе построения и обоснования расчетной схемы была проведена вначале серия 2D расчетов, которые помогли выбрать вид и размер счетной ячейки, обеспечивающей сходимость численного решения с учетом реальных вычислительных ресурсов.

При наличии у расчетной схемы с шестигранными ячейками преимущества, заключающегося в возможности экономии вычислительных ресурсов при обеспечении высокой точности решения, у нее имеется и существенный недостаток, который проявляется без привлечения специальных дополнительных мер при решении задачи в лагранжевой постановке. Происходит “развал” счетной сетки – хорошо известный эффект “песочные часы”. В настоящей работе такой эффект реализуется уже в самом начале расчета. Данная проблема решена в коде ДРАКОН, путем введения в рассмотрение наряду с шестигранными ячейками четырехгранных – тетраэдров, построенных на ребрах шестигранной ячейки, выходящих из одной вершины.

Для решения задачи по моделированию контактного взаимодействия с учетом трения предполагалось, что в результате взаимодействия на поверхность действует нормальная составляющая контактной нагрузки и касательная составляющая нагрузки, величина которой ограничена предельным значением максимального касательного напряжения. Последнее условие соответствует граничному случаю “прилипания” поверхностей. В итоге касательная распределенная нагрузка, обусловленная трением, определяется как  $p_t^{\text{fr}} = \min(\mu \cdot p_n, \beta \cdot \hat{\sigma}_T)$ , где  $p_n$  – контактное давление, а в качестве  $\hat{\sigma}_T$  берется минимальный предел текучести веществ в зоне контакта. В серии 3D расчетов параметр  $\beta$  варьировался таким образом, чтобы расчетное усилие прессы было согласовано с экспериментальным, зафиксированным в аналогичной установке. Тем самым с помощью изменения  $\beta$  осуществлялся подбор эффективного значения  $\hat{\sigma}_T$ .

В четвертой главе на примере двух материала (медь и титан) показаны все этапы процесса моделирования РКУП – от построения физической модели до сравнения с экспериментом. Для анализа поведения образца необходимо построить физическую модель процесса, в основе которой лежат следующие факторы:

- экспериментально определенная диаграмма деформирования материала образца;
- зависимость усилия прессы от смещения пуансона;
- конечная и промежуточная формы образца в процессе РКУП;
- состояние поперечного сечения образца – микротвердость, текстура и т.д.

При построении изотропной модели поведения материала (медь, титана) удалось использовать не только экспериментальные факторы, но и применить теоретически обоснованные особенности процесса РКУП, а именно:

– наличие экспериментальных диаграмм деформирования образцов не только для исходного состояния, но и после первого, второго и последующих проходов.

– теоретическая и подтвержденная в расчете, величина приращения степени накопленной деформации  $\Delta \varepsilon_i = \frac{2}{\sqrt{3}} \approx 1.15$  при угле пересечения каналов установки для

РКУП  $\varphi \equiv 90^\circ$ . Отсюда вытекает предположение, что сдвинув вдоль оси абсцисс на величину аналитического приращения  $+1,15$  кривую деформирования после первого прохода, ее (кривую) можно объединить с аналогичной диаграммой в исходном состоянии и получить новую уточненную диаграмму (рис. 2 и 3), описывающую в изотропном приближении одновременно и первый и второй проходы.

Экспериментальные данные (50 опытов) были также привлечены для определения коэффициента трения - по зависимости усилия прессы от смещения пуансона. В результате серии расчетов для уточнения коэффициента трения наиболее точное совпадение (рис. 4 и 5) для зависимости усилия на пуансоне от перемещения было получено при коэффициенте трения  $f = 0,2$ .

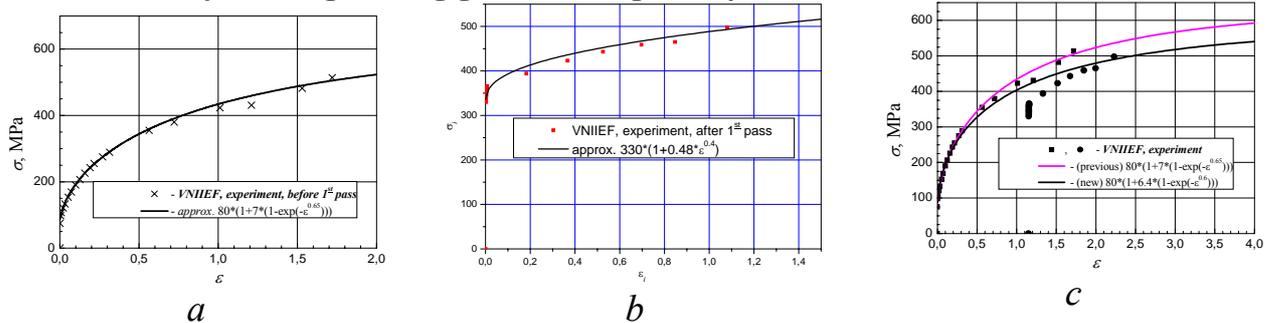


Рисунок 2. Истинные кривые деформирования меди (a) в исходном состоянии, (b) после первого прохода и (c) результирующая.

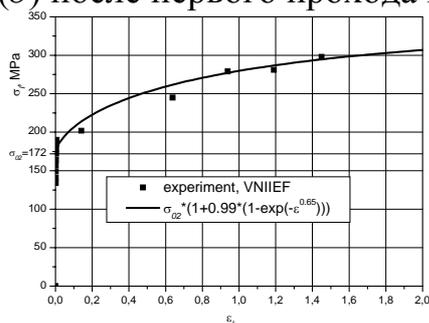
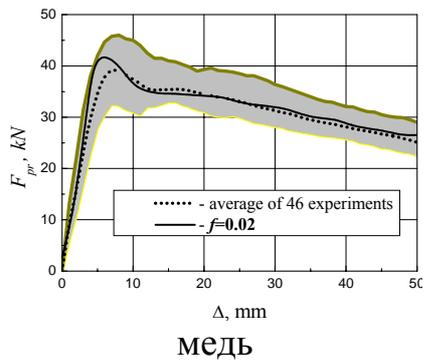
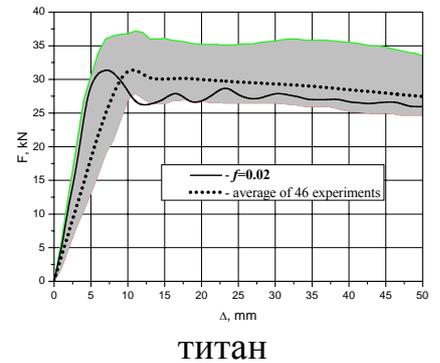


Рисунок 3. Диаграмма деформирования титана.



Рисунки 4–5. Зависимость усилия прессы от перемещения пуансона. Серым цветом выделена область экспериментальных значений.



Результаты моделирования первого прохода оказались наиболее основополагающими с точки зрения валидации построенной модели расчета. Т.к. именно для первого прохода имеется наиболее богатый экспериментальный материал, позволяющий наиболее полно протестировать предлагаемую методику. Большой интерес для анализа состояния образца представляет накопленная пластическая деформация  $\varepsilon_{acc}^{pl} = \int (2/3 \cdot \dot{\varepsilon}_{ij}^p \cdot \dot{\varepsilon}_{ij}^p)^{1/2} dt$ , которая характеризует интегральное во времени поведение материала и которая фактически определяет степень упрочнения. Хотя с практической точки зрения требуется не только улучшить прочностные характеристики испытываемого образца, но и добиться максимально равномерного распределения этих характеристик в объеме. И именно равномерность в объеме заготовки накопленной деформации, как параметра, учитывающего историю деформации, важна для анализа итогового состояния образца.

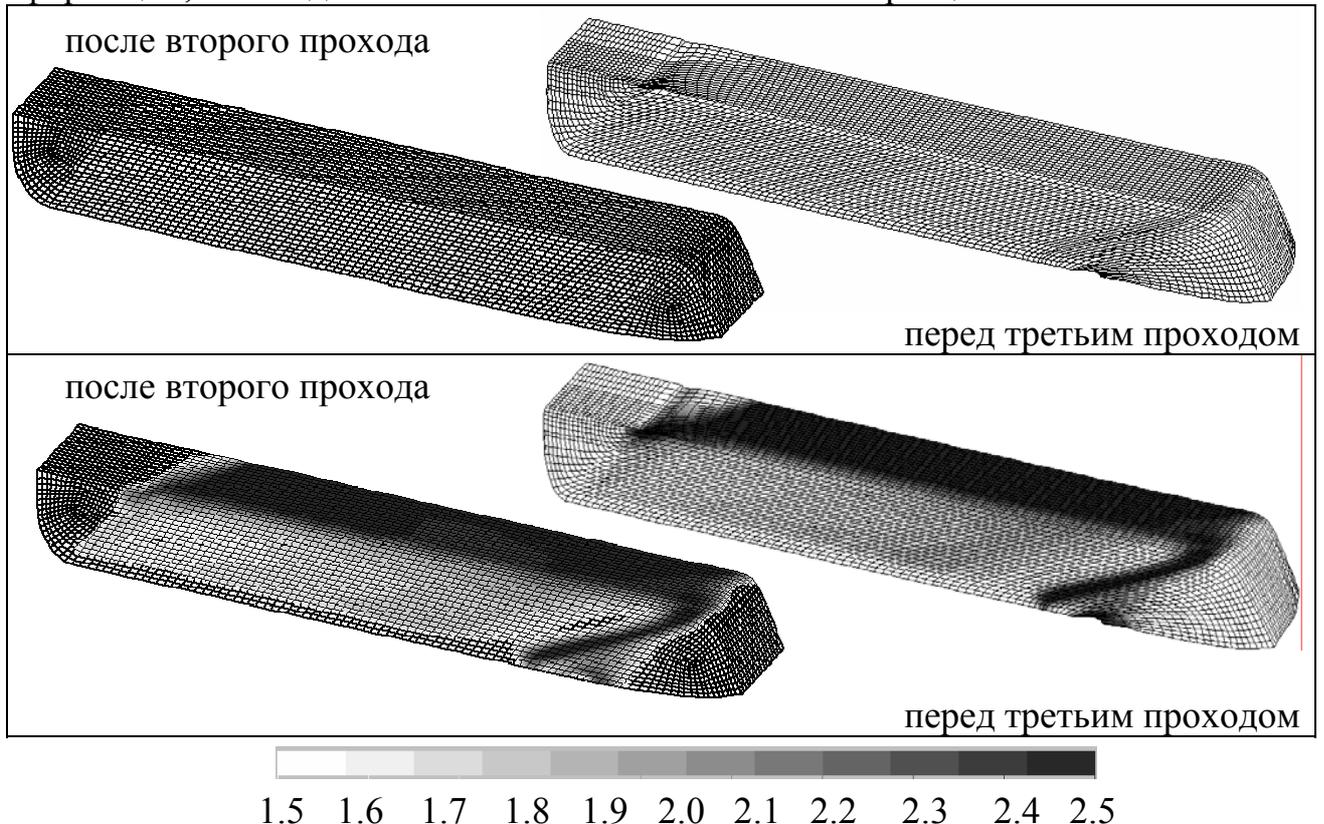


Рисунок 6. Расчетная сетка и поля накопленных деформаций при переходе от второго к третьему проходам, схема В<sub>С</sub>.

На практике любая задача, связанная с моделированием процессов, когда объект исследования испытывает существенные деформации, сопровождается силь-

ным искажением расчетной сетки. Поэтому главной проблемой при моделировании любого последующего прохода РКУП являются:

– новая топология расчетной сетки (рис. 6) с сохранением ограничивающей предыдущий объем заготовки поверхностью. При этом новая сетка должна быть также восьмиузловой шестигранной.

– перенос насчитанных полей деформаций со старой сетки на новую.

Автоматическая перестройка сетки в процессе моделирования одного прохода РКУП недопустима в силу ряда причин, а именно:

1. Процесс перестройки сетки и соответственно перенос полей неизбежно сопровождается потерей точности результатов вычислений, поэтому число перестроений должно быть минимальным.

2. При автоматической перестройке практически невозможно отследить «историю» одной точки в течении одного прохода, т.к. при перестройке меняется топология модели и нумерация узлов и ячеек. А это практически лишает возможности исследования результатов моделирования.

Результаты моделирования второго и последующих проходов показывают, что в рамках предлагаемой методики вполне достаточно перестраивать расчетную сетку лишь при переходе от одного прохода к другому. Другим важным фактором при переходе к новому проходу является геометрическое положение заготовки. Для всех вариантов в процессе перехода между проходами заготовка в расчете геометрически оставалась на месте, тогда как оснастка меняла положение в пространстве в соответствии с маршрутом процесса РКУП. Это позволило избежать переноса системы координат для счетных ячеек заготовки, что неизбежно повлекло бы увеличение погрешности вычислений. Результаты моделирования (рис. 7) первых четырех проходов (и меди, и титана) позволяют сделать выводы, что:

– схема С дает (незначительно) более равномерное распределение накопленной деформации в вертикальном сечении;

– усилие на прессе существенно растет при втором проходе и далее меняется незначительно, что естественно, т.к. основной прирост прочности материала происходит после первого прохода.

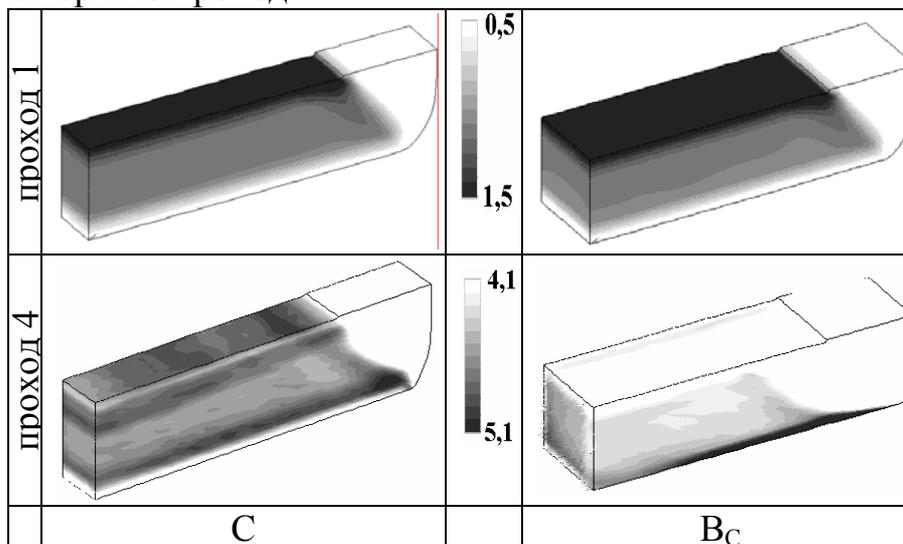


Рисунок 7. Распределение полей накопленных деформаций  $\varepsilon_{pl}^{acc}$ .

Т.к. многие эксперименты проводились в интересах моделирования, и постановка опыта максимально учитывала возможности предлагаемой методики, имелась возможность провести и сравнение результатов расчета с экспериментальными данными, и показать возможность предсказывать новые свойства материалов путем моделирования. Также история деформирования (тензор градиента скоростей), полученная с помощью предлагаемой методики ДРАКОН, передавалась в ИФПМ УГАТУ, где с использованием адаптированного к моделированию процесса РКУП программного кода на базе VPSC и экспериментальных данных по начальному и конечному состояний текстуры моделировалось изменение внутренней структуры материала. Фактически это послужило первым этапом создания в дальнейшем совместного макро и мезокода, позволяющего описывать не только поведение образца на макроуровне, но и пытаться описать внутренние структурные изменения материала.

**В пятой главе** показан пример еще одного практического применения методики, когда рассмотрен подбор параметров установки РКУП путем моделирования таким образом, чтобы обеспечить равномерность новых свойств материала по сечению образца. В качестве главного критерия равномерности использовался уровень накопленной пластической деформации, равномерность которого, как показано ранее, позволяет судить о равномерности свойств в материале.

Процесс практического применения РКУП как способа получения материалов с новыми характеристиками требует, чтобы эти новые свойства были максимально равномерно распределены по образцу. Это позволит снизить процент «жертвенной» части и уровень неравномерности в изделии, полученном из обработанного материала. Была решена задача по определению конструктивных и технологических параметров экспериментальной оснастки, модификация которых может обеспечить однородное состояние образца при его деформации в первом проходе процесса РКУП. Полученные численные результаты (рис. 8) позволили рекомендовать вариант экспериментальной оснастки с внешним  $r=1\text{мм}$  и внутренним  $R=2\text{мм}$  радиусами, как вариант, обеспечивающий наиболее однородное деформированное состояние образца при его первом проходе в процессе РКУП. Очевидно, что и для последующих проходов такая геометрия проходов обеспечивает положительные результаты. Причем этот вариант не только качественнее более сложных по технологии реализации, но и довольно легко реализуем, без трудоемких затрат.

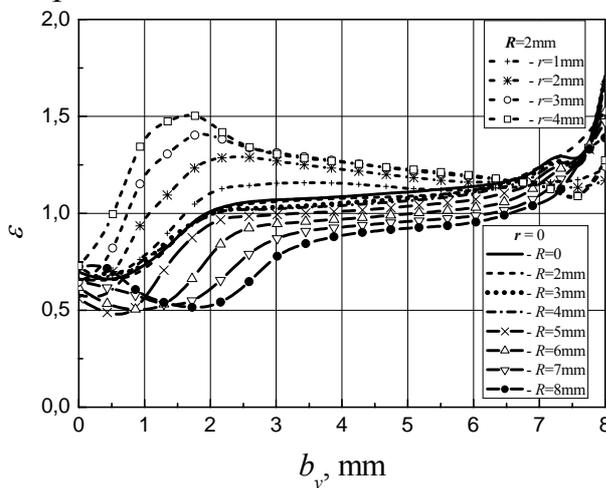


Рисунок 8. Эпюры накопленной пластической деформации по центральному (поперечному) сечению образца в конце первого прохода для различных радиусов скругления.

**В заключении** приводятся основные результаты, полученные в диссертационной работе.

### **ОСНОВНЫЕ ВЫВОДЫ И РЕЗУЛЬТАТЫ.**

В диссертационной работе получены следующие основные результаты:

1. Разработана методика, позволяющая в трехмерном приближении описывать процессы интенсивного деформирования сплошной среды в области низких скоростей деформаций и больших уровней напряжений с учетом контактного взаимодействия. Методика базируется на уравнениях механики сплошных сред и вариационно-разностном методе решения.

Алгоритм перестройки разностной сетки позволяет моделировать процессы деформирования сложных систем с существенным формоизменением расчетной области. Корректность методики проверена на основе сравнения численного решения с известными аналитическими и экспериментальными данными.

2. В результате расчетно-теоретических исследований установлено, что моделирование процесса РКУП на макроуровне позволяет удовлетворительно описывать напряженно-деформированное состояние, присущее ИПД. Выявлены основные факторы, влияющие на формирование равномерного поля пластических деформаций, такие как трение заготовки о поверхность оснастки; геометрия зоны пересечения каналов; количество проходов; маршрут прессования.

3. Экспериментальные данные показывают возможность разработанной методики для корректного описания процессов, происходящих в заготовке при РКУП. Показана возможность предсказания характера распределения новых характеристик в наноматериалах – твердости, прочности и т.п..

4. Выявлены теоретически и подтверждены экспериментально оптимальные параметры процесса РКУП для получения максимально возможного однородного состояния заготовки. Даны практические рекомендации, реализация которых позволила существенно повысить качество обрабатываемых заготовок.

### **ОСНОВНЫЕ ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ**

#### ***В рецензируемых журналах из списка ВАК***

1. Оптимизация процесса РКУП меди. первый проход / П.Н. Низовцев, А.А. Смоляков, В.П. Соловьев, А.И. Коршунов // Физика и химия обработки материалов. 2005. №2, С. 14–18

#### ***В других изданиях***

2. Трехмерное численное моделирование процесса РКУП / П.Н. Низовцев, А.И. Коршунов, А.А. Смоляков, В.П. Соловьев // Обзор передовых исследований в области материаловедения. 2005. Т.10. С. 34–40. (Статья на англ. яз.).

3. Макромоделирование равноканального углового прессования технически чистой меди / П.Н. Низовцев, А.И. Коршунов, А.А. Смоляков, В.П. Соловьев // Труды РФЯЦ – ВНИИЭФ. 2005. №9. С. 56–63.

4. Численное моделирование процесса РКУП меди. Второй проход / П.Н. Низовцев, А.И. Коршунов, А.А. Смоляков, В.П. Соловьев // Тр. конф. TMS, Сан-Франциско, США, 2005. №4. С. 121–122 (Статья на англ. яз.).

5. Влияние числа проходов и маршрута РКУП на однородность механических свойств в медных заготовках / А.И. Коршунов, А.А. Смоляков, В.П. Соловьев, И.И. Ведерникова, Л.В. Поляков, Т.Н. Кравченко // Обзор передовых исследований в области материаловедения. 2005. №10. С.235–238. (Статья на англ. яз.).
6. Моделирование РКУП / И.В.Александров, И.Н.Будилов, Г.Краллик, Х.С.Ким, С.К.Ён, А.И.Коршунов, А.А.Смоляков, В.П.Соловьев // Форум материаловедения. 2005. Т.503–504. С. 201–208. (Статья на англ. яз.).
7. Компьютерное моделирование процесса формирования текстуры в ходе интенсивных пластических деформаций / И.В. Александров, М.В. Жилина, А.В. Щербаков, П.Н. Низовцев, А.И. Коршунов, А.А. Смоляков, В.П. Соловьев // Тр. конф. Мец, Франция, 2005. (Статья на англ. яз.).
8. Влияние числа проходов и маршрута РКУП на однородность механических свойств в заготовках из титана VT1-0 / А.И. Коршунов, А.А. Смоляков, В.П. Соловьев, И.И. Ведерникова, Л.В. Поляков, Т.Н. Кравченко // Форум Материаловедения 2005. Т.503–504. С. 693–698. (Статья на англ. яз.).
9. Компьютерное моделирование поведений конструкций АЭС в условиях динамического деформирования / В.П. Соловьев, А.И. Абакумов, П.Н. Низовцев, А.В. Певницкий, А.А. Смоляков // Труды РФЯЦ – ВНИИЭФ. 2005. № 8. С. 58–67.
10. Формирование кристаллографической текстуры в ходе ИПД / И.В. Александров, М.В. Жилина, А.В. Щербаков, П.Н. Низовцев, А.И. Коршунов, А.А. Смоляков, В.П. Соловьев, И. Бейерлайн, Р.З. Валиев // Архивы металлургии и материаловедения. 2005. Т.50. № 2. С. 281. (Статья на англ. яз.).
11. Влияние числа проходов РКУП на скоростную чувствительность ультра чистой меди / А.И. Коршунов, А.А. Смоляков, В.П. Соловьев, И.И. Ведерникова, Л.В. Поляков, Т.Н. Кравченко // Ультра мелкозернистые материалы IV / Под ред. Ю. Жу. Сан-Антонио, США, 2006. С. 351–356. (Статья на англ.яз.).
12. Численное моделирование процесса РКУП. Многопроходность / А.И. Коршунов, А.А. Смоляков, В.П. Соловьев // Ультра мелкозернистые материалы IV. / Под ред. Ю. Жу. Сан-Антонио, США, 2006. С. 140–145. (Статья на англ.яз.).
13. Формирование текстуры в процессе интенсивных пластических деформаций / И.В. Александров, М.В. Жилина, А.В. Щербаков, П.Н. Низовцев, А.И. Коршунов, А.А. Смоляков, В.П. Соловьев, Ай. Бейерлайн // Форум материаловедения. 2006. Т.495–497. С. 785–790. (Статья на англ.яз.).
14. Численное моделирование процесса РКУП / А.И. Коршунов, А.А. Смоляков, В.П. Соловьев // Высокие давления – 2006. Тр. конф. Судак, Украина, 2006. С.124.
15. Влияние числа проходов РКУП на скоростную чувствительность титана VT1-0 / А.И. Коршунов, А.А. Смоляков, В.П. Соловьев, И.И. Ведерникова, Л.В. Поляков // Высокие давления – 2006. Тр. конф. Судак, Украина, 2006. С. 15.

### *Патент*

Патент RU 2 276 626 С2. Штамп для равноканального углового прессования / А.И. Коршунов., П.И. Голубев, Л.В. Поляков, А.А. Смоляков. Опубликовано 20.05.2006 Бюл. №14