

Modelowanie histerezy w martenzytycznych materiałach wielofazowych

M.S. KUCZMA

Instytut Budownictwa, Uniwersytet Zielonogórski
ul. Z. Szafrana 2, 65-516 Zielona Góra

*Pracę tę dedykuję Panu Profesorowi Gwidonowi Szeferowi
z wyrazami głębokiego szacunku i podziękowania*

Praca dotyczy zagadnienia martenzytycznej przemiany fazowej w przypadku tak zwanego problemu wielu studni. Energię efektywną mieszaniny wielu faz (austenitu i wariantów martenzytu) aproksymuje się lokalnie funkcją kwadratową z wykorzystaniem parametrów wewnętrznych w postaci udziałów objętościowych poszczególnych wariantów martenzytu. Ewolucyjne zagadnienie początkowo-brzegowe sformułowane w postaci nierówności wariacyjnej. Wyjściowy problem jest niewypukły, można jednak pokazać, że przy przyjętych założeniach istnieje jednoznaczne rozwiązanie tej nierówności na kroku czasowym. Po dyskretyzacji metodą elementów skończonych nierówność wariacyjną rozwiązano jako liniowe zadanie komplementarne. Zamieszczone wyniki obliczeń numerycznych dla tarczy z materiału wielofazowego ilustrują charakterystyczną pętlę histerezy w przestrzeni przemieszczenie-siła.

1. WSTĘP

Praca dotyczy matematycznego modelowania zjawiska histerezy obserwowanej w tak zwanych materiałach martenzytycznych i symulacji numerycznej zagadnień początkowo-brzegowych dla konstrukcji wykonanych z takich materiałów. Przez materiał martenzytyczny rozumiemy materiał, który doznaje martenzytycznej przemiany fazowej (m.p.f.). To niezwykle zjawisko występuje w wielu materiałach o budowie krystalicznej, głównie w stopach na bazie niklu i miedzi, gdzie zaobserwowano intrygujący efekt pamięci kształtu. Przemiana martenzytyczna jest procesem odkształceniowym związanym ze zmianą siatki krystalograficznej, w którym materiał będący w fazie o większej symetrii, nazywanej *austenitem*, przechodzi nagle w fazę o mniejszej symetrii, nazywanej *martenzytem*. Martenzyt może występować w wielu odmianach krystalograficznych

nazywanych wariantami. Przemiana martenzytyczna jest przemianą pierwszego rzędu, bezdyfuzyjną, odbywającą się przez nukleację i rozwój nowej fazy, o wyraźnej dominacji odkształceń postaciowych (towarzyszące jej odkształcenia objętościowe są praktycznie pomijalne). M.p.f. jest wynikiem przyjmowania przez układ stanów o minimalnej energii (lokalne minima, stany meta stabilne), i może być wywołana przez zmiany temperatury, naprężenia lub pola elektromagnetycznego. Chciaż m.p.f. jest procesem krystalograficznie odwracalnym, z termodynamicznego punktu widzenia jest to proces nieodwracalny gdyż towarzyszy mu dyssypacja energii ujawniająca się w postaci charakterystycznych pętli histerezy w przestrzeniach wielkości go opisujących.

Zagadnienie martenzytycznej przemiany fazowej i towarzyszącego jej efektu pamięci kształtu ma już bardzo bogatą literaturę, dotyczącą różnych jego aspektów na gruncie metalurgii, krystalografii, mechaniki kontinuum i matematyki. Wymieńmy tu opracowanie [7] i prace [1, 6, 3, 8, 5], które były inspiracją podejścia zastosowanego w tej pracy, będącej uzupełnieniem [4] o analizę numeryczną przypadku wielu faz.

Problem martenzytycznej przemiany fazowej dla przypadku 3D mieszaniny wielu faz formułujemy w postaci nierówności wariacyjnej. Dodajmy tutaj, że nierówności wariacyjne, będąc naturalnym uogólnieniem zasad wariacyjnych na przypadek minimalizacji funkcjonałów na zbiorach wypukłych, stanowią wygodne narzędzie w analizie jakościowej i numerycznej różnorodnych problemów mechaniki [9]. W analizowanym tutaj przypadku, istnienie jednoznacznego rozwiązania problemu przyrostowego opisanego nierównością wariacyjną jest zapewnione [4], gdy uwzględnimy wymagania stawiane przez II zasadę termomechaniki w kontekście dyssypacji energii towarzyszącej m.p.f. Wykorzystując metodę elementów skończonych rozwiązujemy nierówność wariacyjną jako liniowe zadanie komplementarne. Załączone wyniki symulacji numerycznych dla pasma z materiału wielofazowego, utwierdzonego na jednym końcu a na przeciwnym obciążonego, ilustrują charakterystyczne pętle histerezy w przestrzeni siła–przemieszczenie (w warunkach izotermicznych).

2. PROBLEM WIELU STUDIUM

W tym rozdziale podajemy sformułowanie problemu początkowo-brzegowego dla ciała, którego materiał ulega odwracalnej przemianie martenzytycznej. Materiał ulegający m.p.f. traktujemy jako kompozyt składający się z austenitu, oznaczanego tutaj indeksem $i = N + 1 \equiv a$, i N wariantów martenzytu. Każdą z faz (wariantów) charakteryzują jej odkształcenia własne (fazowe) \mathbf{D}_i , przy czym bez utraty ogólności można przyjąć, że $\mathbf{D}_a = \mathbf{0}$.

Dla każdej z faz przyjmujemy energię swobodną Helmholtza W_i , $i =$

$1, 2, \dots, N + 1$ w postaci funkcji kwadratowej

$$W_i(\mathbf{E}, \theta) = \frac{1}{2} (\mathbf{E} - \mathbf{D}_i) \cdot \mathbb{A}_i (\mathbf{E} - \mathbf{D}_i) + \varpi_i(\theta), \quad (1)$$

gdzie $\mathbb{A}_i = \mathbb{A}$ oznaczają tensory sprężystości poszczególnych faz, które dla prostoty przyjęto takie same. Oznaczając przez c_i udziały objętościowe poszczególnych faz możemy uśrednioną energię mieszaniny zapisać następująco

$$\widetilde{W}(\mathbf{E}, \mathbf{c}) = \frac{1}{2} (\mathbf{E} - \mathbf{D}(\mathbf{c})) \cdot \mathbb{A} [\mathbf{E} - \mathbf{D}(\mathbf{c})] + \sum_{i=1}^{N+1} c_i \varpi_i + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N+1} \sum_{j=1}^{N+1} c_i c_j B_{ij}, \quad (2)$$

gdzie efektywne odkształcenie fazowe $\mathbf{D}(\mathbf{c})$ jest wypukłą kombinacją,

$$\mathbf{D}(\mathbf{c}) \equiv \sum_{i=1}^{N+1} c_i \mathbf{D}_i, \quad \text{dla } c_i \geq 0, \quad \sum_{i=1}^{N+1} c_i = 1, \quad (3)$$

a elementy B_{ij} macierzy \mathbf{B} są stałymi materiałowymi.

Nierówność dyssypacyjną wynikającą z II zasady termomechaniki można zapisać jako

$$\mathcal{D} = -\frac{\partial \widetilde{W}}{\partial \mathbf{c}} \cdot \dot{\mathbf{c}} \equiv \mathbf{X} \cdot \dot{\mathbf{c}} = \sum_{m=1}^N X_m \dot{c}_m \geq 0, \quad (4)$$

gdzie siła napędowa \mathbf{X} jest macierzą kolumnową o składnikach

$$X_m = \mathbf{D}_m \cdot \mathbb{A} [\mathbf{E}] - \sum_{i=1}^N (\mathbf{D}_m \cdot \mathbb{A} [\mathbf{D}_i] + B_{mi}^*) c_i - (\varpi_m - \varpi_a) - B_{am}. \quad (5)$$

Uwzględniając (4) wprowadzamy funkcje progowe $\kappa_m^+ \equiv \max\{L_m c_m, 0\}$, $\kappa_m^- \equiv \min\{L_m(c_m - 1), 0\}$, i postulujemy następujące kryterium zachodzenia m.p.f. dla każdego wariantu martenzytu (L_m stałe materiałowe, $1 \leq m \leq N$):

jeśli	$X_m(\mathbf{c}) = \kappa_m^+(c_m)$	wtedy	$\dot{c}_m \geq 0$	(6)
jeśli	$X_m(\mathbf{c}) = \kappa_m^-(c_m)$	wtedy	$\dot{c}_m \leq 0$	
jeśli	$\kappa_m^-(c_m) < X_m(\mathbf{c}) < \kappa_m^+(c_m)$	wtedy	$\dot{c}_m = 0$	

Równania równowagi sprężystej przyjmują formę

$$\operatorname{div} \mathbb{A}[\mathbf{E}(\mathbf{u}) - \mathbf{D}(\mathbf{c})] + \mathbf{f} = \mathbf{0}. \quad (7)$$

gdzie \mathbf{f} jest wektorem obciążeń masowych.

3. NIERÓWNOŚĆ WARIACYJNA

Dla typowego kroku czasowego $t_{n-1} \rightarrow t_n$ zdefiniujemy przyrosty skończone wektora przemieszczenia $\Delta \mathbf{u}_n$ i macierzy kolumnowej udziałów fazowych $\Delta \mathbf{c}_n$ następująco: $\mathbf{u}_n = \mathbf{u}_{n-1} + \Delta \mathbf{u}_n$, $\mathbf{c}_n = \mathbf{c}_{n-1} + \Delta \mathbf{c}_n$. Problem przyrostowy dla warunków (7) i (6) w słabej postaci daje się ująć nierównością wariacyjną.

Znaleźć parę $(\Delta \mathbf{u}_n, \Delta \mathbf{c}_n) \in V(t_n) \times K(\mathbf{c}_{n-1})$ taką, że

$$a(\Delta \mathbf{u}_n, \mathbf{v}) - g(\Delta \mathbf{c}_n, \mathbf{v}) = f_{n,n-1}(\mathbf{v})$$

$$\mp g(\mathbf{z}_\pm - \Delta \mathbf{c}_n^\pm, \Delta \mathbf{u}_n) \pm h(\Delta \mathbf{c}_n, \mathbf{z}_\pm - \Delta \mathbf{c}_n^\pm) \geq \mp b_{n-1}^\pm(\mathbf{z}_\pm - \Delta \mathbf{c}_n^\pm)$$

dla wszystkich $\mathbf{v} \in V(t_n)$, $\mathbf{z}_\pm \in K_\pm(\mathbf{c}_{n-1})$.

gdzie:

$$a(\mathbf{w}, \mathbf{v}) = \int_{\Omega} \mathbb{A}[\nabla \mathbf{w}] \cdot \nabla \mathbf{v} \, dx$$

$$g(\mathbf{w}, \mathbf{v}) = \sum_{m=1}^N \int_{\Omega} w_m \mathbb{A}[\mathbf{D}_m] \cdot \nabla \mathbf{v} \, dx$$

$$h(\mathbf{w}, \mathbf{v}) = \sum_{m=1}^N \sum_{i=1}^N \int_{\Omega} (\mathbf{D}_m \cdot \mathbb{A}[\mathbf{D}_i] + B_{mi}^* + \delta_{mi} L_m) w_m v_i \, dx \quad (9)$$

$$f_{n,n-1}(\mathbf{v}) = \int_{\Omega} \Delta \mathbf{f}_n \cdot \mathbf{v} \, dx + (\text{terms on } \Gamma)_{n,n-1}$$

$$b_{n-1}^\pm(\mathbf{w}) = \sum_{m=1}^N \int_{\Omega} [B_{am} + (\varpi_m - \varpi_a) + L_m(c_{m,n-1} - p_{m,n-1})^\pm] w_m \, dx$$

$$\mp g(\mathbf{w}, \mathbf{u}_{n-1}) \pm h(\mathbf{c}_{n-1}, \mathbf{w}).$$

$V(t_n)$ jest zbiorem kinematycznie dopuszczalnych przyrostów przemieszczeń ciała zajmującego obszar $\Omega \in \mathcal{R}^d$. Zbiory ograniczeń zmiany części dodatniej $\Delta \mathbf{c}_n^+$ i ujemnej $\Delta \mathbf{c}_n^-$ udziałów fazowych martenzytu są zdefiniowane poniżej

$$\begin{aligned} K(\mathbf{z}) &= \left\{ \mathbf{w} \in L^2(\Omega, \mathcal{R}^N) \mid |w_i| \leq 1, 0 \leq \sum_{i=1}^N (z_i + w_i) \leq 1, \mathbf{z} \in Z \right\} \\ K_+(\mathbf{z}) &= \left\{ \mathbf{w} \in L^2(\Omega, \mathcal{R}^N) \mid w_i \geq 0, \sum_{i=1}^N (z_i + w_i) \leq 1, \mathbf{z} \in Z \right\} \\ K_-(\mathbf{z}) &= \left\{ \mathbf{w} \in L^2(\Omega, \mathcal{R}^N) \mid w_i \geq 0, z_i - w_i \geq 0, \mathbf{z} \in Z \right\} \\ Z &= \left\{ \mathbf{z} \in L^2(\Omega, \mathcal{R}^N) \mid z_i \geq 0, \sum_{i=1}^N z_i \leq 1 \right\}. \end{aligned} \quad (10)$$

4. LINIOWE ZADANIE KOMPLEMENTARNE

Stosując metodę elementów skończonych możemy sprowadzić nierówność (8) do liniowego zadania komplementarnego (dopełniającego)

$$\boxed{\begin{aligned} \bar{\mathbf{A}} \mathbf{x}_n + \mathbf{y}_n &= \mathbf{b}_{n,n-1} \\ \mathbf{x}'_n \geq \mathbf{0}, \mathbf{y}_n^1 &= \mathbf{0}, \mathbf{y}_n \geq \mathbf{0}, \mathbf{x}_n^T \mathbf{y}_n = 0 \end{aligned}} \quad (11)$$

gdzie \mathbf{x}_n jest wektorem niewiadomych wartości węzłowych aproksymacji MES, \mathbf{y}_n oznacza wektor zmiennych dopełniających, a wektor $\mathbf{b}_{n,n-1}$ jest znany w chwili t_n . Przez \mathbf{x}'_n oznaczamy elementy wektora \mathbf{x}_n bez wektora $\mathbf{x}_n^1 \equiv \Delta \mathbf{u}_n$, który nie jest ograniczony w znaku. Macierz $\bar{\mathbf{A}}$ i wektory $\mathbf{x}_n, \mathbf{b}_{n,n-1}$ mają następującą strukturę

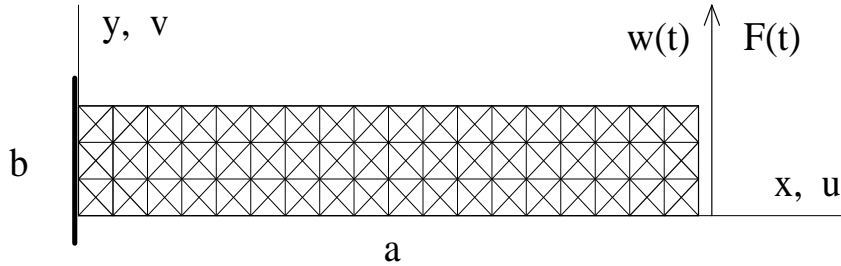
$$\bar{\mathbf{A}} = \begin{bmatrix} -\mathbf{K} & \mathbf{G}^T & -\mathbf{G}^T & & & & \\ \mathbf{G} & -\mathbf{H} & \mathbf{H} & -\mathbb{I}_1^T & -\mathbb{I}_\Delta^T & & \\ -\mathbf{G} & \mathbf{H} & -\mathbf{H} & \mathbb{I}_1^T & & & -\mathbb{I}_\Delta^T \\ & \mathbb{I}_1 & -\mathbb{I}_1 & & & & \\ & \mathbb{I}_\Delta & & & & & \\ & & \mathbb{I}_\Delta & & & & \end{bmatrix}, \quad (12)$$

$$\mathbf{x}_n = \begin{bmatrix} \Delta \mathbf{u}_n \\ \Delta \mathbf{c}_n^+ \\ \Delta \mathbf{c}_n^- \\ \mathbf{r}_n^1 \\ \mathbf{r}_n^{0+} \\ \mathbf{r}_n^{0-} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b}_{n,n-1} = \begin{bmatrix} \mathbf{f}_{n,n-1}^u \\ \mathbf{b}_{n-1}^c \\ \mathbf{b}_{n-1}^c \\ \mathbf{1} - \mathbf{c}_{n-1} \\ \mathbf{c}_{n-1}^+ \\ \mathbf{c}_{n-1}^- \end{bmatrix}. \quad (13)$$

Macierz sztywności \mathbf{K} , macierz prostokątna $\mathbf{G} =$ wiersz $[\mathbf{G}_1, \dots, \mathbf{G}_N]$, oraz macierz kwadratowa $\mathbf{H} = [\mathbf{H}_{11}, \dots, \mathbf{H}_{NN}]$, generowane są przez formy dwuliniowe (9)₁₋₃ dla przyjętych funkcji bazowych pola przemieszczenia i pól udziałów fazowych. Macierze $\mathbb{I}_1, \mathbb{I}_\Delta$ wynikają z ograniczeń (10), a towarzyszące im niewiadome wektory $\mathbf{r}_n^1, \mathbf{r}_n^{0+}, \mathbf{r}_n^{0-}$ pełnią rolę mnożników Lagrange'a tych nierównościowych więzów.

5. PRZYKŁAD LICZBOWY

Dla ilustracji przewidywań rozpatrywanego tutaj modelu m.p.f. przeprowadzono obliczenia numeryczne zagadnienia dwuwymiarowego dla pasma wykonanego ze stopu *Cu-Al-Ni*. Analizowano pasmo o stosunku boków $a:b=18:3$, zamocowane na lewym końcu i obciążone na końcu przeciwnym. Proces odkształcania sterowany był przemieszczeniem $w(t)$. Warunki podparcia i obciążenie pasma pokazano na rys. 1. Pasma podzielono na $18 \times 3 \times 4 = 216$ trójkątnych elementów skończonych. Pole przemieszczeń aproksymowano kwadratowymi funkcjami kształtu, natomiast pola frakcji fazowych - liniowymi funkcjami kształtu. Zadanie (11) rozwiązano własnym programem komputerowym, zob. [4].



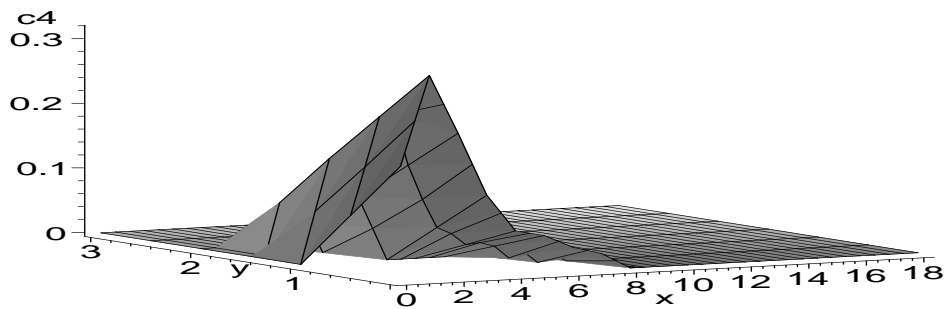
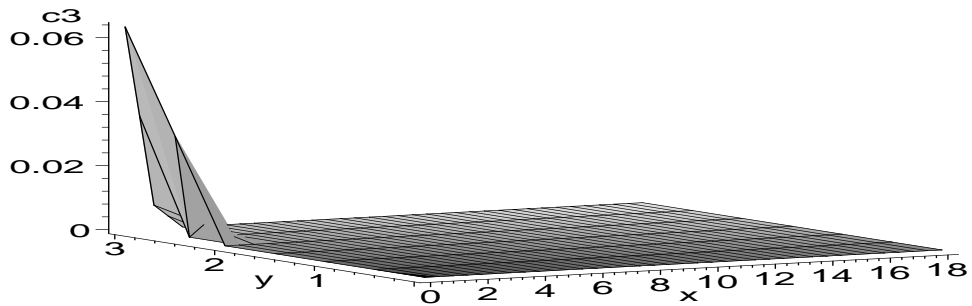
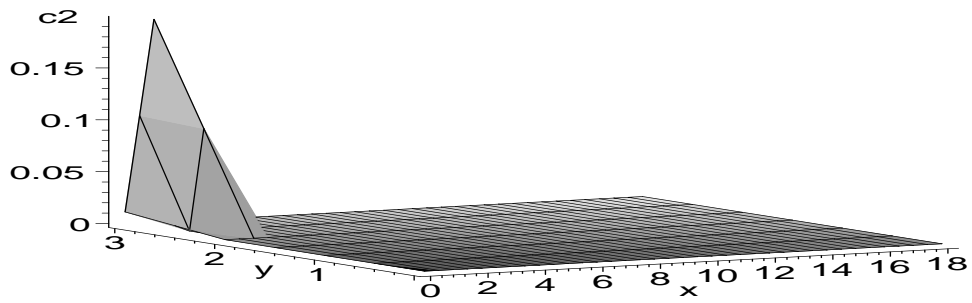
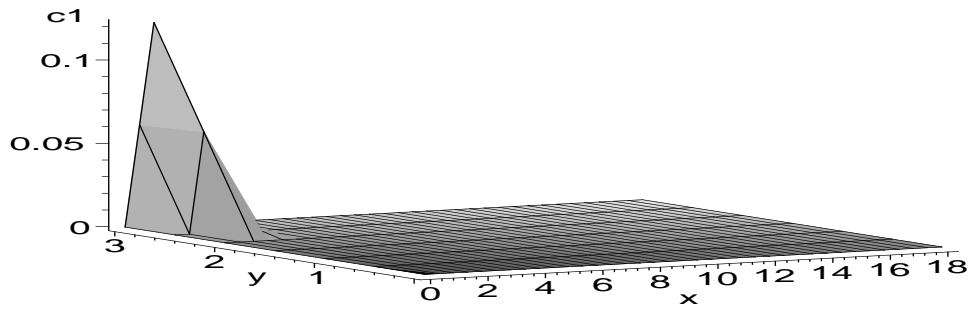
Rysunek 1: Pasma z materiału wielofazowego, $a:b=6:1$, poddane quasi-statycznemu wymuszeniu kinematycznemu $w(t)$.

Traktując problem jako dwuwymiarowy możemy wyróżnić w analizowanym przypadku stopu *Cu-Al-Ni* doznającego m.p.f. typu *układ regularny* \rightarrow *układ rombony* (*cubic* \rightarrow *orthorhombic*) cztery jako istotne z sześciu możliwych wariantów martenzytu. Tensory odkształceń fazowych tych wariantów martenzytu, mierzone względem odkształceń zerowych austenitu, $D_5 = \mathbf{0}$, są następujące, por. [2]:

$$D_1 = \begin{bmatrix} 0.04245 & 0 \\ 0 & -0.09620 \end{bmatrix}, \quad D_2 = \begin{bmatrix} 0.04245 & 0.01945 \\ 0.01945 & 0.04245 \end{bmatrix},$$

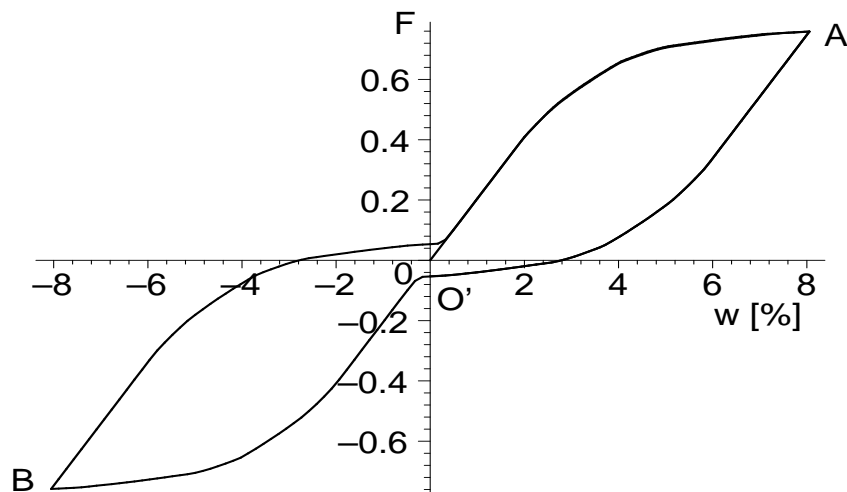
$$D_3 = \begin{bmatrix} 0.04245 & -0.01945 \\ -0.01945 & 0.04245 \end{bmatrix}, \quad D_4 = \begin{bmatrix} -0.09620 & 0 \\ 0 & 0.04245 \end{bmatrix}.$$

Pozostałe brakujące dane przyjęto nawiązując do wyników pracy [6], kierując się zasadą nie wyróżniania żadnego z wariantów: moduł Younga $E = 10\,000.0$ MPa, współczynnik Poissona $\nu = 0.3$, różnica w energiach stanu swobodnego, $\Delta\varpi = \varpi_m - \varpi_5 = 3.756$ J/m³. Ponadto, przyjęto parametry związane z dyssypacją energii, $B_{ii} = 0$, $B_{ij} = 0.50$ J/m³, dla $i, j = 1, \dots, N+1 = 5, i \neq j$, $L_m = 1.02$ J/m³, $m = 1, \dots, N = 4$.



Rysunek 2: Rozkłady frakcji martenzytu c_i dla max. $w(t)$, pkt A na rys. 3.

Wyniki numeryczne na rys. 2 i 3 odpowiadają kinematycznemu wymuszeniu $w(t)$ wywołującemu pętlę 0-A-B-A-O'. Szczególną uwagę zwraca fakt niezerowych przemieszczeń przy zerowej sile F i odwrotnie.



Rysunek 3: Pętla histerezy między przemieszczeniem poprzecznym względnym w/a a prawego boku tarczy i odpowiadającą mu siłą F .

Podziękowanie Praca naukowa finansowana ze środków Komitetu Badań Naukowych w latach 2003-2006 jako projekt badawczy.

Bibliografia

- [1] J. Ball, R. James, Fine phase mixtures as minimizers of energy, *Arch. Rational Mech. Anal.*, 100(1):13–52, 1987.
- [2] K. Bhattacharya, Comparison of the geometrically nonlinear and linear theories of martensitic transformation, *Continuum Mech. and Thermodyn.*, 5:205–242, 1993.
- [3] R. Kohn, The relaxation of a double-well energy, *Continuum Mech. Thermodyn.*, 3:193–236, 1991.
- [4] M.S. Kuczma, *Application of variational inequalities in the mechanics of plastic flow and martensitic phase transformations*, PP, Poznań, 1999.
- [5] V. I. Levitas, E. Stein, M. Lengnick, On a unified approach to the description of phase transition and strain localization, *Arch. Appl. Mech.*, 66:242–254, 1996.

- [6] I. Müller, H. Xu, On the pseudoelastic hysteresis. *Acta metall. mater.*, 39:263–271, 1991.
- [7] W.K. Nowacki (red.), *Podstawy termomechaniki materiałów z pamięcią kształtu*, IPPT PAN, Warszawa, 1996.
- [8] B. Raniecki, C. LExcellent, K. Tanaka, Thermodynamic models of pseudoelastic behaviour of shape memory alloys. *Arch. Mech.*, 44:261–284, 1992.
- [9] G. Szefer, Zasady wariacyjne w metodach komputerowych mechaniki, w: *Mater. V Konf. Metod Komputerowych w Mech.*, 65–83, Wrocław 1981.

Summary

The paper is concerned with the so-called multi-well martensitic phase transformation problem. The effective energy of the mixture of phases (austenite and many variants of martensite) is approximated locally by a quadratic function and use is made of internal variables which are volume fractions of all martensitic variants. This evolutionary initial-boundary value problem is formulated in the form of a variational inequality. Although the original problem is non-convex, it can be shown that under imposed assumptions there exists a unique solution to the derived variational inequality on a single time-step (incremental problem). After the finite element discretization, the resulting variational inequality is solved as a sequence of linear complementarity problems. The included numerical results illustrate the characteristic hysteresis loop in space displacement-force which we have obtained for a disk made of a shape memory material with a number of martensitic variants.

This paper has appeared in the book dedicated to Professor Gwidon Szefer on the occasion of His 70th birthday:

Rozprawy z mechaniki konstrukcji i materiałów. Sesja jubileuszowa. Politechnika Krakowska im. T. Kościuszki, Monografia 302, Kraków 2004, s. 161–169.

Uwaga. Artykuł ten ukazał się w książce wydanej z okazji Jubileuszu 70. urodzin Profesora Gwidona Szefera:

Rozprawy z mechaniki konstrukcji i materiałów. Sesja jubileuszowa. Politechnika Krakowska im. T. Kościuszki, Monografia 302, Kraków 2004, s. 161–169.