

Matematické modelování mobility martenzitických mikrostruktur

Ondřej Glatz

Katedra matematiky
Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská
České vysoké učení technické v Praze



- Plně implementovat model navržený v rámci výzkumného úkolu pro výpočet uložené elastické energie nekompatibilních martenzitických mikrostruktur.
- S pomocí vytvořeného modelu analyzovat nekompatibilní mikrostruktury pozorované v ÚT AVČR.
- Navrhnout a implementovat model pohyblivých martenzitických mikrostruktur.
- Vyšetřit mobilitu pozorovaných mikrostruktur.

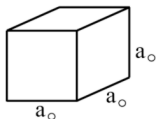
- 1 Martenzitická fázová transformace
 - Vlastnosti
 - Matematický popis
 - Rovnovážné struktury
- 2 Modelování nekompatibilních mikrostruktur
 - Vlastnosti nekompatibilních mikrostruktur
 - Modifikovaný model rovnovážných struktur
 - Mobilita martenzitických mikrostruktur
- 3 Výsledky
- 4 Závěr

Vlastnosti martenzitické transformace

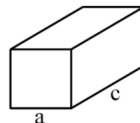
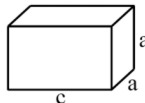
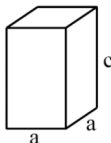
Vlastnosti martenzitické transformace

- Reverzibilní fázová transformace 1. druhu.
- Bezdifúzní. Malá změna parametrů krystalové mříže.
- Vysokoteplotní fáze – **austenit** – vysoce symetrická.
- Nízkoteplotní fáze – **martenzit** – nižší symetrie.
- Více možných energeticky ekvivalentních variant martenzitu.

Austenit



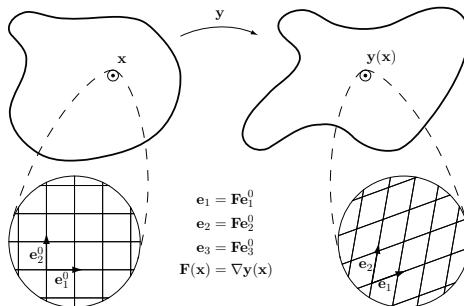
Martenzit



Matematický popis transformace

Matematický popis transformace

- Fázovou transformaci chápeme jako deformaci krystalové mřížky.
- Popisujeme ji pomocí afinního zobrazení: $\mathbf{y} : (\mathbb{R}^3) \rightarrow \mathbb{R}^3$.
- Každá fáze je reprezentována pozitivně definitní maticí $\mathbf{U}$ z polárního rozkladu gradientu $\nabla \mathbf{y} = \mathbf{F} = \mathbf{R}\mathbf{U}$.



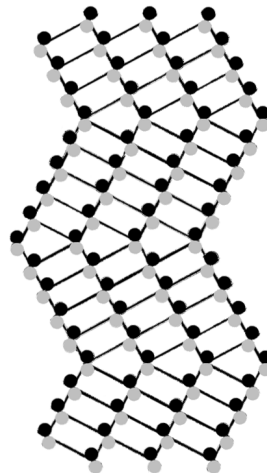
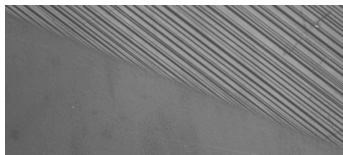
Rovnovážné struktury

Kompatibilita variant

- Struktura zahrnující více variant martenzitu musí splňovat *podmínky kompatibility* vyplývající z požadavku na spojitost deformace.
- Sousedící varianty $\mathbf{U}_1$ a $\mathbf{U}_2$ musí splňovat tzv. **Hadamardovu podmínku**:

$$\mathbf{R}\mathbf{U}_1 - \mathbf{U}_2 = \mathbf{a} \otimes \mathbf{n}.$$

- Nekompatibilita s okrajovými podmínkami vede ke vzniku jemné struktury – **martenzitické mikrostruktury**, která podmínky kompatibility splní alespoň limitně.



Klasický model

Klasický model

- Předpokládá se, že za daných okrajových podmínek výsledná struktura **globálně** minimalizuje volnou energii materiálu.
- To vede na variační problém pro funkcionál

$$W(\theta, \nabla \mathbf{y}) = \int_{\Omega} w(\theta, \mathbf{U}(\mathbf{x})) \, d\mathbf{x}, \quad \mathbf{U} = \sqrt{\nabla \mathbf{y}^T \nabla \mathbf{y}},$$

$$\mathbf{y}|_{\partial\Omega} = \mathbf{y}_0(\mathbf{x}) \quad \forall \quad \nabla \mathbf{y}|_{\partial\Omega} = \mathbf{F}(\mathbf{x}).$$

- Kvůli multikonvexnosti funkce $w(\theta, \cdot)$ má tento problém obecně jen asymptotické řešení ve tvaru minimalizující posloupnosti deformací.
- Minimalizující posloupnosti lze přiřadit makroskopický deformační gradient a zobecnit tak Hadamartovu podmínku i na tyto posloupnosti.

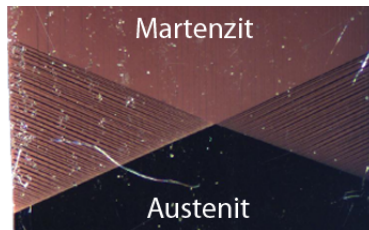
Vlastnosti nekompatibilních mikrostruktur

Mikrostruktury lambda a X

- Žádná z možných kombinací variant martenzitu nesplňuje podmínku kompatibility makroskopických gradientů.
- Nelze nalézt globálně minimalizující posloupnost.
- Kompatibilita je možná jen za přítomnosti elastické deformace.



Obrázek: Lambda mikrostruktura



Obrázek: X mikrostruktura

Modifikovaný model rovnovážných struktur

Úprava klasického modelu

- Mikrostruktura nemusí globálně minimalizovat volnou energii.
- Mikrostruktura lokálně minimalizuje energii elastické deformace.

Analýza mikrostruktur λ a X

- Byl zaveden pojem *míry nekompatibility deformačních gradientů* jako

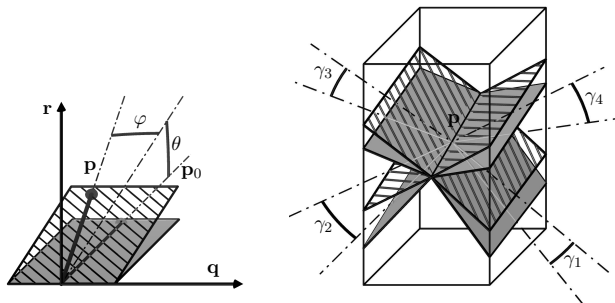
$$\min_{\|\mathbf{n}\|=1} \max_{\substack{\mathbf{t} \perp \mathbf{n} \\ \|\mathbf{t}\|=1}} \|\mathbf{Ft} - \mathbf{Gt}\| .$$

- Odpovídající rovina minimální nekompatibility určuje přibližný odhad polohy skutečného rozhraní mezi nekompatibilními oblastmi.
- Porovnáváním odhadovaných poloh fázových rozhraní s mikrosnímky pozorovaných mikrostruktur byly identifikovány varianty martenzitu tvořící tyto mikrostruktury.

Určení optimální geometrie mikrostruktury

Postup

- Geometrii mikrostruktury vhodně parametrizujeme.
- Pomocí kritéria minimální nekompatibility určíme přibližné hodnoty parametrů.
- Získané parametry použijeme jako počáteční bod pro optimalizační proceduru minimalizující elastickou energii mikrostruktury.

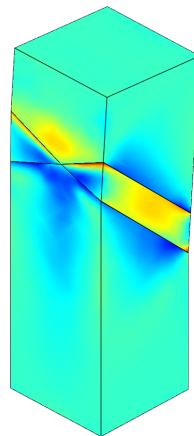
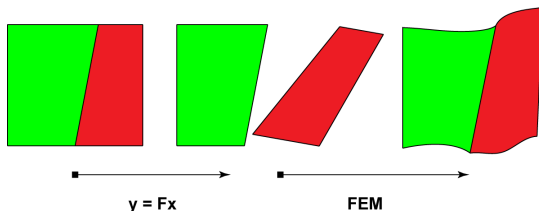


Obrázek: Parametrizace geometrie mikrostruktury

Výpočet elastické deformace a energie

Výpočet elastické deformace a energie

- Transformaci z austenitu do martenzitu modelujeme jako neelastickou deformaci danou makroskopickými deformačními gradienty následovanou elastickou deformací vyrovnávající vzniklou nekompatibilitu.
- První část transformace je počítána v MATLABu, následující úloha lineární elasticity je řešena metodou konečných prvků (FEM) implementovanou v programu Comsol Multiphysics.



Obrázek: Hydrostatické napětí (rozměry vzorku 15 mm × 4,7 mm × 4,6 mm)

Mobilita martenzitických mikrostruktur

Model

- Zkoumáme časový vývoj parametrů mikrostruktury při spontánní fázové transformaci při stálých vnějších podmínkách.
- Založeno na Biotově variačním principu virtuální disipace:

$$\frac{dE}{dt} = \frac{dA}{dt} + \frac{1}{2} \int_V \sigma_{ij}^{\text{diss.}} \dot{\epsilon}_{ij} d\mathbf{x} \rightarrow \min ,$$

$$A = c_m \mathcal{V}_m + c_a \mathcal{V}_a + E_e .$$

- Optimalizujeme vzhledem k 7 geometrickým parametrům mikrostruktury a rychlosti jejich změn.

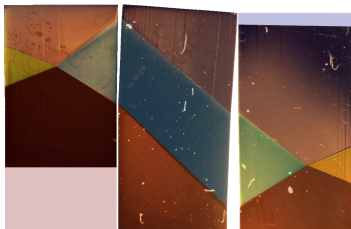
Parametry

- c_m a c_a – hustoty transformační energie martenzitu a austenitu.
- Disipační tenzor:

$$\sigma^{\text{diss.}} = \mu_V \frac{\text{tr } \dot{\epsilon}}{3} \mathbf{I} + \mu_S \left(\dot{\epsilon} - \frac{\text{tr } \dot{\epsilon}}{3} \mathbf{I} \right) .$$

- μ_V a μ_S – parametry objemové a smykové viskozity.

Optimální geometrie mikrostruktur lambda a X



Obrázek: Lambda mikrostruktura

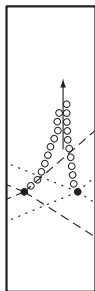


Obrázek: X mikrostruktura

Porovnání optimální geometrie s experimentem

- Průměrná odchylka přibližně $1,5^\circ$.
- Optimální geometrie je „blízko“ výchozí (odhad pomocí kritéria minimální nekompatibility je tedy dostatečně přesný).
- Chyby způsobeny pravděpodobně použitým zjednodušením geometrie (rovinná rozhraní, homogenizovaný laminát. . .)

Mobilita mikrostruktur lambda a X



Lambda



X

Obrázek: Schéma pohybu mikrostruktur

X

Obrázek: Vývoj smykového napětí v mikrostruktuře X

Vývoj mikrostruktury

- Obě pozorované mikrostruktury se vyvíjí směrem k nekompatibilnímu stavu.
- Postupně se vyrovnává rozložení napětí podél všech rozhraní.

- Výsledky práce

- Ukázali jsme, že pozorované mikrostruktury nesplňují podmínky kompatibility vyžadované klasickým modelem.
- Navrhli jsme modifikaci klasického modelu tak, abychom byli schopni s těmito nekompatibilními mikrostrukturami pracovat.
- Ověřili jsme, že nový model dobře předpovídá parametry rovnovážných mikrostruktur.
- Vytvořili jsme model schopný podchytit spontánní vývoj nekompatibilních mikrostruktur.

- Související publikace

- Seiner, H. - Glatz, O. - Landa, M.: Interfacial Microstructures in Martensitic Transitions: From Optical Observations to Mathematical Modeling. *International Journal for Multiscale Computational Engineering*, 2009.
- Glatz, O. - Seiner, H. - Landa, M.: FEM Modelling of Elastically Strained Interfacial Microstructures in Cu-Al-Ni Single Crystals, In: *The 8th European Symposium on Martensitic Transformations*, 2009.
- Přednáška na mezinárodní konferenci ESOMAT 2009.

Otázka

Běžně se hustota uložené energie modeluje jako bodové minimum z energií jednotlivých variant martensitu/austenitu. Máte nějaký návrh jak toto modifikovat, aby to zachytilo i Vámi popsané beznapětové stavy?

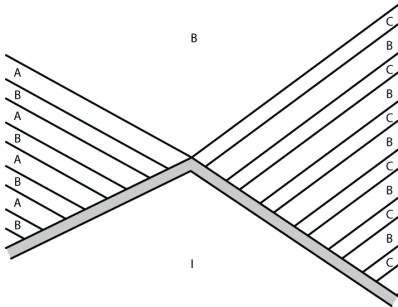
- St. Venant–Kirchhoff: $w(\theta, \mathbf{U}) = \min_k \{ (\mathbf{U} - \mathbf{U}_k^*)^T \mathbf{C} (\mathbf{U} - \mathbf{U}_k^*) + d_k(\theta) \}$

$$W(\theta, \mathbf{y}) = \int w(\theta, \mathbf{U}(\mathbf{x})) \, d\mathbf{x} \rightarrow \min \quad (*)$$

- Kvůli nesplněným podmínkám kompatibility nelze pro pozorované mikrostruktury integrál minimalizovat bodově.
- Při transformační teplotě lze položit $d_k = 0$. Navíc, pro každý bod máme variantu $\mathbf{U}_k^*$ určenou z experimentu, netřeba proto hledat minimum přes k .
- Úloha (*) tak přejde v minimalizaci elastické energie, jak je použito v práci.

Otázka

Je něco známo o tom, jestli jsou mikrostruktury typu lambda a X laminátem? Tedy jestli příslušná Youngova míra splňuje Jensenovu nerovnost pro všechny rank-1 konvexní funkce?



Obrázek: Mikrostruktura X

- Bez elastické deformace:

$$\nu = \mu_1 \delta_I + \mu_2 \delta_B + \mu_3 (\lambda_1 \delta_A + (1 - \lambda_1) \delta_B) + \mu_4 (\lambda_2 \delta_B + (1 - \lambda_2) \delta_C)$$
- Nerovnost

$$W(\int_{\mathbb{R}^{3,3}} \mathbf{A} \, d\nu) \leq \int_{\mathbb{R}^{3,3}} W(\mathbf{A}) \, d\nu$$
 je splněna pro každou rank-1 konvexní funkci W , pokud platí podmínky kompatibility gradientů.
- Jinak obtížně řešitelná úloha. Při přítomnosti elastické deformace nejsme schopni jednoduše určit ani míru ν .