



ФІЗИКА

УДК 669. 76: 548. 24

*В. И. Башмаков, Т. С. Чикова, И. П. Юценко***ПРОГРАММНОЕ КОМПЬЮТЕРНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОГО И ТЕОРЕТИЧЕСКОГО ИССЛЕДОВАНИЯ
МЕХАНИЧЕСКОГО ДВОЙНИКОВАНИЯ МЕТАЛЛОВ**

Основная задача материаловедения состоит в изучении взаимосвязи структуры и свойств вещества с целью целенаправленного воздействия на него при создании материалов с заданными физическими характеристиками, а также в прогнозировании срока их службы. Одним из наиболее слабых звеньев в разработке комплексной проблемы описания пластической деформации, упрочнения и разрушения твердых тел является отсутствие строгих научных представлений о пластической деформации двойникованием реальных кристаллов, в которых деформация скольжением и двойникованием, а зачастую и разрушение, протекают одновременно, взаимодействуя между собой.

К настоящему времени известно, что реальная прочность кристаллов определяется рядом микропроцессов: генерированием и перемещением точечных дефектов, движением, размножением и взаимодействием дислокаций, зарождением и ростом микротрещин. Разработаны дислокационные представления физических процессов, протекающих при скольжении, чистом двойниковании и разрушении.

Экспериментально установлено, что элементарные акты пластической деформации и разрушения – размножение и движение дислокаций – в реальных кристаллах, содержащих различного рода дефекты структуры, носят случайный характер, поэтому наиболее адекватным языком их описания являются теория вероятностей и математическая статистика.

Статистические методы успешно развиваются во всех отраслях материаловедения. Они стали неотъемлемой частью аппарата теоретического анализа и одновременно важным инструментом экспериментального исследования реальных кристаллов [1].

В многообразии применения статистических методов можно выделить три основные задачи, которые они решают: обработка результатов экспериментальных наблюдений, описание физических процессов, основу которых составляют случайные события (описание случайных процессов), создание математического аппарата науки.

Научную основу статистического подхода к описанию процессов прочности и пластичности составили экспериментально наблюдаемые особенности движения дислокаций – спонтанный скачкообразный характер их перемещения, связанный с периодическими остановками на стопорах [2]. Статистический анализ свойств дислокационных ансамблей [3] привел к построению кинетической теории дислокаций [4], положенной в основу статистической теории деформационного упрочнения [5], статистической теории прочности [6], вероятностно-статистической оценки долговечности материалов [7].

Элементарными актами пластической деформации двойникованием являются зарождение и движение двойникующих дислокаций. Развитие механического двойника в металле на начальной стадии во многом определяется локальными особенностями структуры микрообъема материала, который вовлекается в пластическую деформацию, а также другими неконтролируемыми факторами, что предопределяет вероятностную природу этого явления.

Для вероятностных физических процессов невозможно непосредственно из экспериментальных измерений получить простые динамические соотношения, устанавливающие однозначное соответствие между изучаемой характеристикой и параметрами воздействия.

Впервые статистический подход к изучению механического двойникования металлов осуществлен в работе [8].

Получение достоверной количественной информации о закономерностях пластической деформации двойникованием в реальных кристаллах связано с проведением большого числа идентичных экспериментальных испытаний с последующим анализом статистических данных об изменении того или иного физического параметра, характеризующего явление. Поиски аналитических зависимостей, описывающих кинетику процесса двойникования, требуют

математического моделирования, сопряженного с трудоемкими теоретическими расчетами. Комплексное экспериментальное и теоретическое исследование механического двойникования металлов включает в себя два последовательных этапа, выполнение которых немислимо без применения современной вычислительной техники.

1-ый этап: накопление статистических экспериментальных сведений об изменении изучаемых параметров двойниковых прослоек; сортировка и обработка данных с поиском необходимого объема выборки и достоверного шага гистограммирования; построение серии статистических графиков и оценка их достоверности с помощью обоснованно выбранного критерия; физический анализ эволюции экспериментальных статистических распределений исследуемого параметра и выявление объективных закономерностей процесса; разработка физической модели развития пластической деформации двойникованием в металле.

2-ой этап: создание вероятностной математической модели роста клиновидного механического двойника в реальном кристалле с учетом наличия стопоров различной мощности и физической природы; вывод аналитической функции, аппроксимирующей экспериментальные статистические графики распределения случайной величины; выяснение физического смысла параметров теоретического распределения и поиски их количественной связи с известными характеристиками изучаемого кристалла и условиями его деформирования.

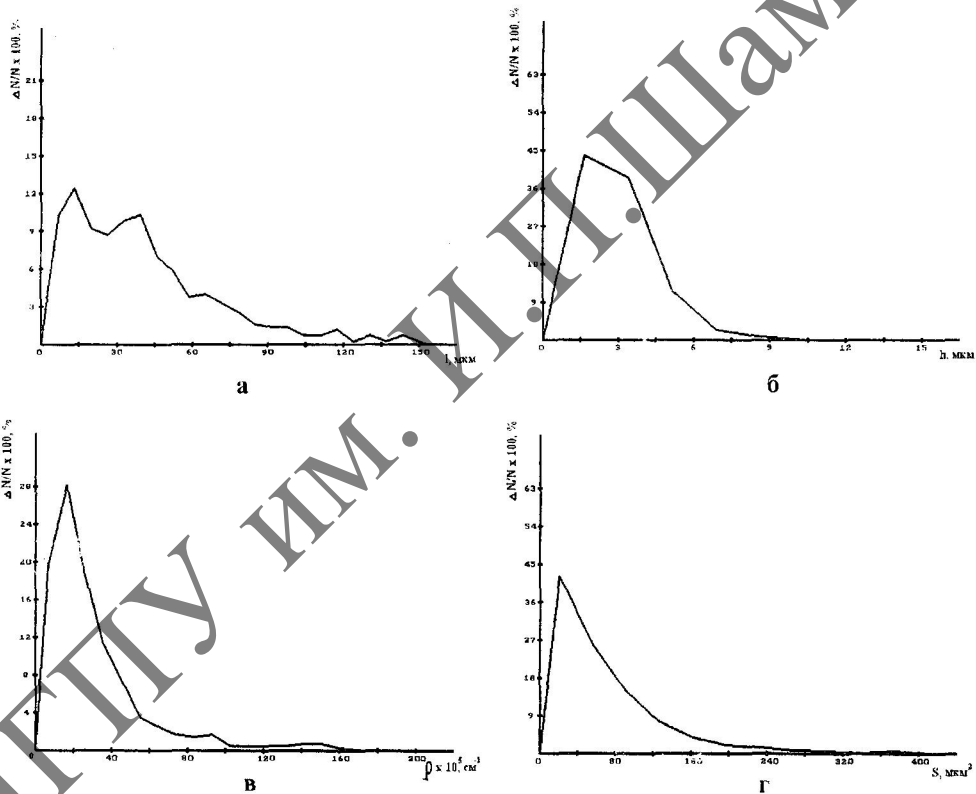


Рис. 1. Статистические графики распределения клиновидных двойников при действии статической нагрузки 0,2 Н:

а - по длинам; б - по толщинам; в - по плотностям двойниующих дислокаций на границах; г - по двойникованным площадям

Для реализации первого этапа исследования разработана компьютерная программа в системе программирования высокого уровня Турбо Паскаль с использованием объектно-ориентированного программирования – библиотеки Turbo-Vision. Выбор системы программирования не случаен. С одной стороны, она основывается на достаточно простом языке программирования Паскаль, с другой – позволяет разрабатывать мощные современные профессиональные программы по управлению базами данных.



Программа по обработке экспериментальных статистических данных, полученных при изучении клиновидных механических двойников, позволяет вводить в файл числовую информацию о длинах и толщинах прослоек; при необходимости корректировать значения введенных величин; вносить дополнения в файл в случае продолжения однотипных измерений; выводить на экран и распечатывать все введенные в файл значения в виде вариационного ряда; по полученным данным рассчитывать среднюю плотность двойникующих дислокаций на границах каждой двойниковой прослойки и величины сдвойникованных объемов; применять все перечисленные манипуляции по статистической обработке расчетных величин.

С помощью программы можно строить статистические графики распределений клиновидных двойников по длинам (Рис. 1а), толщинам (Рис. 1б), плотностям двойникующих дислокаций на границах (Рис. 1в), сдвойникованным площадям (Рис. 1г), изменяя шаг гистограммирования в широких пределах в диалоговом режиме, а также делать распечатки данных статистической обработки выборки для их дальнейшего анализа.

Полученную графическую информацию можно использовать во всех широко распространенных приложениях Windows, таких, как Microsoft Word, Microsoft Excel и др., пользуясь при этом всеми доступными им средствами для редактирования графиков. Подобные возможности программы особенно важны для проведения сравнительного физического анализа экспериментальных данных.

Теоретическое исследование статистического процесса и его математическое моделирование – наиболее сложная часть программы. Аналитическая функция, аппроксимирующая экспериментальные статистические распределения клиновидных двойников по длинам, представляет собой композицию нормального и пуассоновского законов распределений случайных зависимых величин [9]:

$$P(x) = \frac{e^{-\lambda_1 - \lambda_2}}{G\sqrt{2\pi}} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\lambda_1^n \lambda_2^k}{n! k!} e^{-\frac{(x-a-n-2k)^2}{2G^2}} \quad (1)$$

Теоретическая функция имеет вид сложного математического выражения, содержащего ряд параметров, имеющих феноменологическую природу. Подбор количественных значений этих параметров, удовлетворяющих требованиям хорошего согласования кривых экспериментального и теоретического распределений клиновидных двойников по длинам, – это процесс длительных и кропотливых расчетов. Для определения параметров n , k , G , a , λ_1 , λ_2 и построения теоретических графиков аппроксимирующей функции (1) разработана компьютерная программа StatAnalizLong в системе программирования высокого уровня Турбо Паскаль с использованием элементов объектно-ориентированного программирования, совместимая с программой Windows и всеми ее приложениями.

Программа позволяет строить теоретические графики плотностей вероятностей распределений клиновидных двойников по длинам, изменяя перечисленные параметры в широких пределах, выводить на экран и делать распечатки значений функции для их анализа. Подбор параметров и корректировка графика проводится в удобном диалоговом режиме. Предусмотренная функция «след» дает возможность визуально анализировать характер изменения теоретической кривой при смене значений как отдельно взятого параметра, так и их комбинаций. Основными преимуществами программы являются: быстрота и наглядность при подборе необходимого параметра распределения, возможность сравнивать меняющийся теоретический график с аппроксимируемой экспериментальной статистической кривой, автоматическая машинная оценка качества аппроксимации по методу Пирсона.

Как показывает опыт использования программы, при соответствующем подборе параметров теоретическая функция дает хорошее совпадение с экспериментальным графиком распределения клиновидных двойников по длинам (Рис. 2), что свидетельствует как о достоинствах самой программы, так и об истинности физической гипотезы, заложенной в математическую модель, на основании которой получена аппроксимирующая функция.

Созданные компьютерные программы значительно упрощают и оптимизируют процесс обработки экспериментальных данных и теоретического анализа процесса пластической деформации двойникованием реальных кристаллов, а также открывают новые перспективы планирования исследований в этой области.

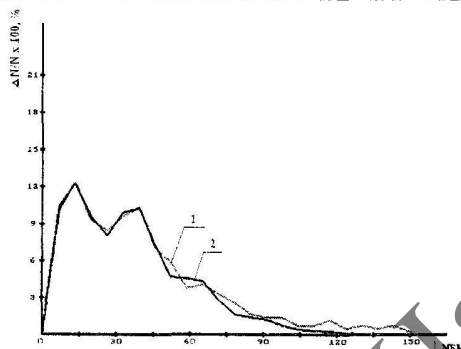


Рис. 2. Экспериментальный (1) и теоретический (2) графики распределения двойников по длинам при действии статической нагрузки 0,2 Н

Литература

1. Богачев И. Н., Вайнштейн А. А., Волков С. Д. Введение в статистическое металловедение. -М.: Металлургия, 1972. -216 с.
2. Боржковская В.М., Ландау А.И., Шарийский В.Б. Исследование линий скольжения в монокристаллах с помощью построения графиков статистических распределений расстояний между ямками травления // ФТТ. -1965. -Т. 7, Вып. 7. -С. 2136-2146.
3. Стратан И. В., Предводителев А. А. Моделирование процесса движения дислокаций в дислокационном ансамбле // ФТТ. -1970.-Т.12, № 6. -С. 1729-1733.
4. Лихачев В. А., Волков Ф. Е., Шудегов В. Е. Континуальная теория дислокаций.- Л.: Изд-во Ленингр. ун-та, 1986.
5. Садыков Ф. А., Соковнин Ю. П., Рыбалко Ф. П., Шевченко Р.И. Физика металлов и их соединений. - Свердловск: Изд-во Урал. ун-та, 1974.
6. Карпинский Д. Н. Статистическая теория роста трещин в неоднородном материале. -Л., 1977.
7. Степанов М. Н. Статистические методы обработки результатов механических испытаний. -М.: Машиностроение, 1985.
8. Башмаков В. И., Чикова Т. С. Кинетика образования клиновидных двойников в кристаллах висмута // Физика металлов и металловедение. -1981. -Т. 51, Вып. 5. -С. 1066-1072.
9. Башмаков В. И., Чикова Т. С. Юдин М. Д. Роль стопоров в развитии клиновидных двойников в металлическом кристалле // Весці АН БССР. Сер. фіз.- мат. навук. -1983. -№ 6. -С. 113.

Summary

Two computer programs for the realization of the statistical method applied to experimental and theoretical investigations of the mechanical twinning of metallic crystals are described. The mathematical model of the wedge - shaped twin growth permits to get the satisfactory coincidence of numerical and experimental data.