

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Пермский национальный исследовательский политехнический университет»

На правах рукописи



Швейкин Алексей Игоревич

**МНОГОУРОВНЕВЫЕ МОДЕЛИ ДЛЯ ОПИСАНИЯ ПЛАСТИЧЕСКОГО
И СВЕРХПЛАСТИЧЕСКОГО ДЕФОРМИРОВАНИЯ
ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МЕТАЛЛОВ И СПЛАВОВ**

Специальность 01.02.04 – Механика деформируемого твердого тела

Диссертация на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Научный консультант:
д.ф.-м.н., профессор П.В. Трусков

Пермь – 2019

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение	4
Сокращения	17
Основные обозначения	19
1. Анализ современного состояния моделирования неупругого деформирования моно- и поликристаллических металлов и сплавов: подходы и проблемы	22
1.1. Основные подходы к формулировке определяющих соотношений	23
1.2. Формализм подхода, основанного на явном введении в структуру конститутивных моделей внутренних переменных и эволюционных уравнений для этих параметров	36
1.3. О многоуровневых моделях, основанных на физических теориях неупругости и введении внутренних переменных	42
2. Двухуровневые статистические конститутивные модели	69
2.1. Структура двухуровневой модели для описания неупругого деформирования поликристаллов	69
2.2. Соотношения для определения скорости неупругого деформирования кристаллита за счет внутризеренного дислокационного скольжения	82
3. Подход к формулировке кинематических и определяющих соотношений с учетом симметричных свойств мезоуровня	104
3.1. Построение геометрически нелинейных моделей механики деформируемого твердого тела: подходы и проблемы	104
3.2. Подход к построению кинематических и скоростных определяющих соотношений для поликристаллических металлов и сплавов при больших градиентах перемещений, основанный на использовании многоуровневого моделирования	112
4. Анализ двухуровневых моделей материалов и полные постановки задач исследования с их помощью поведения образцов и конструкций	128
4.1. Аналитическое сопоставление моделей мезоуровня с разными упругими соотношениями и с разным определением спинов	128
4.2. Полные постановки задач исследования поведения образцов и конструкций с помощью двухуровневых моделей материалов	140

5. Алгоритмы реализации и анализ результатов применения моделей для описания поведения моно- и поликристаллов	149
5.1. Краткое описание алгоритмов реализации математических моделей	149
5.2. Анализ результатов моделирования отдельных кристаллитов и поликристаллов	155
5.3. Исследование чувствительности многоуровневых моделей к возмущению параметров и воздействий	183
6. Трехуровневая модель с возможностью описания режима структурной сверхпластичности и переходов между режимами деформирования	194
6.1. Анализ результатов экспериментальных исследований и существующих моделей для описания сверхпластического деформирования	194
6.2. Трехуровневая модель, включающая описание ключевых механизмов деформирования и изменения структуры	216
6.3. Процедура идентификации и анализ результатов моделирования	233
Заключение	253
Список литературы	258

Введение

Актуальность темы исследования и степень ее разработанности

Развитие современных технологий термомеханической обработки материалов и изделий, создания новых конструкционных и функциональных материалов в значительной мере определяется возможностью их детального математического моделирования. Физико-механические свойства материалов определяются состоянием их структуры, которая существенно изменяется при неупругом деформировании. Поэтому для совершенствования существующих и разработки новых методов термомеханической обработки необходимо решение актуальной задачи на «стыке» нелинейных механики и физики деформируемого твердого тела – построения моделей материалов (конститутивных моделей, определяющих соотношений), способных описывать эволюцию их структуры и эффективных свойств при деформировании (анализ современного состояния в области моделирования неупругого деформирования моно- и поликристаллических металлов и сплавов представлен в главе 1).

В последние десятилетия для решения этой задачи все большее признание находит подход, основанный на явном введении в структуру определяющих соотношений параметров, называемых внутренними переменными и отражающих состояние и изменение мезо- и микроструктуры, и формулировке на базе сведений из физики твердого тела и материаловедения эволюционных уравнений для этих параметров (обзоры приведены в публикациях Y.B. Guo, M.F. Horstemeyer, G.A. Maugin, D.L. McDowell, K. Saï, D. Sheng, J. Zhao и др.; краткий обзор приведен в [127, 145]). Это позволяет за счет введения необходимого числа внутренних переменных и соотношений для их эволюции вместо операторной или функциональной формы определяющих соотношений использовать системы (обыкновенных) дифференциальных и алгебраических соотношений (при этом свойство памяти учитывается в конститутивной модели – история воздействий отражается в совокупности изменяющихся значений внутренних переменных). В рамках данного подхода возможно построение многоуровневых моделей с явным

учетом структуры и механизмов деформирования на различных масштабных уровнях.

Существенный вклад в развитие многоуровневых моделей материалов внесен отечественными исследователями: В.А. Лихачевым и В.Г. Малининым, В.В. Рыбиным, учеными томской научной школы В.Е.Панина (заложили основы новой дисциплины, находящейся на стыке механики деформируемого твердого тела и физики твердого тела и посвященной – в том числе – изучению эволюции структуры материала – физической мезомеханики), уральской школы механиков, основанной С.Д. Волковым (Ю.В. Соколкиным, А.А. Ташкиновым, В.Э. Вильдеманом и др.), А.Е. Волковым и др. Стоит отметить, что формулировки многоуровневых моделей металлов и сплавов, как правило, базируются на физических соотношениях для описания процессов на мезоуровне (в ряде работ – с привлечением микро- и атомарного уровней). Значительный вклад в развитие таких соотношений внесен в работах А.В. Вахрушева, М.Д. Кривилева, А.М. Кривцова, П.В.Макарова, С.Г.Псахье, В.А.Романовой и др.

В последние десятилетия весьма интенсивно развиваются построенные в рамках подхода с введением внутренних переменных многоуровневые модели для описания поведения поликристаллических металлов и сплавов, основанные на физических теориях пластичности (ФТП), которые, в отличие от математических макрофеноменологических теорий, базируются на явном рассмотрении физических механизмов неупругой деформации и их носителей – дефектов кристаллического строения. Поскольку в значительной мере эти механизмы реализуются на уровне кристаллитов, в англоязычной литературе для ФТП используется название «crystal plasticity». Пионерские работы в данном направлении были опубликованы в 30-50х гг. XX века (G.I. Taylor, J.F.W. Bishop, R. Hill, G. Sachs, T. Lin и др.), однако применение моделей данного класса до определенного времени сдерживалось недостаточными возможностями вычислительной техники. В связи с существенным увеличением компьютерных мощностей в последние десятилетия развитие данного направления происходит весьма интенсивно. Существенный вклад в усовершенствование аппарата многоуровневых моделей внесен работами зарубежных исследователей (L. Anand,

R.J. Asaro, I.J. Beyerlein, C.A. Bronkhorst, G. Cailletaud, L. Delannay, O. Diard, A.M. Habraken, M.F. Horstemeyer, S.R. Kalidindi, M. Kothari, S. Li, D.L. McDowell, A. Needleman, F. Roters, P. Van Houtte и др.; краткий обзор приведен в [141, 142, 427]). К сожалению, в России модели данного класса в настоящий момент не столь популярны (хотя и наблюдается устойчивый рост интереса к ним), можно отметить работы В.А. Лихачева, В.Г. Малинина, П.В. Трусова, П.В. Макарова, В.А. Романовой, Р.Р. Балахонова.

Несмотря на значительный прогресс в создании многоуровневых моделей поликристаллов, обычно включающих описание механизмов внутризеренного дислокационного скольжения, ротаций решеток кристаллитов и двойникования, достигнутый в работах вышеуказанных и других авторов, возрастающую интенсивность опубликования результатов исследований по данному направлению в ведущих мировых журналах по механике, как следует из проведенного обзора, к настоящему времени остаются нерешенными многие важные вопросы, что обусловлено, в первую очередь, сложностью построения моделей на стыке механики и физики твердого тела (мезомеханики). Условно их можно разделить на общие, относящиеся ко всем моделям данного класса, и вопросы развития конкретных моделей с целью их применения для более широких диапазонов (механических и температурных) воздействий, когда важным становится учет других, отличных от перечисленных выше, механизмов неупругого деформирования.

Среди вопросов первой группы особой важностью отличается вопрос обоснованной формулировки геометрически нелинейных кинематических и определяющих соотношений, поскольку для большинства технологических процессов термомеханической обработки металлов и сплавов характерны большие градиенты перемещений. Существенный вклад в развитие методологии построения макрофеноменологических нелинейных моделей МДТГ внесли многие ученые (Г.Л. Бровко, П.А. Жилин, А.А. Ильюшин, В.И. Кондауров, А.В. Коновалов, С.Н. Коробейников, В.Н. Кукуджанов, В.И. Левитас, А.И. Лурье, А.А. Маркин, Ю.И. Няшин, А.А. Поздеев, А.А. Роговой, Л.И. Седов, П.В. Трусов, A. Bertram, O.T. Bruhns, Y.F. Dafalias, A.E. Green, G. Jaumann, J. Mandel, P.M.

Naghdi, W. Noll, M.V. Rubin, C. Trusdell, H. Xiao, S. Zaremba и др. [143, 146, 427]). Однако стоит отметить, что подавляющее число известных работ посвящено формулировке соотношений для упруго-изотропных материалов. Между тем для металлов и сплавов важным представляется учет симметричных свойств как при формулировке соотношений мезоуровня с учетом анизотропии упругих свойств решетки, так и на макроуровне – из-за образования и изменения текстуры симметричные свойства макроуровня эволюционируют. По мнению автора, вопрос построения геометрически нелинейных моделей МДТТ для анизотропных материалов при неупругом деформировании, особенно – с изменяющимися симметричными свойствами, не является полностью решенным (это следует из проведенного обзора, представленного в главе 3). В то же время имеются значительные перспективы для решения этой важной задачи с использованием многоуровневого подхода в связи с тем, что для большинства металлических материалов на мезомасштабном уровне возможно выделение геометрических элементов, характеризующих симметрию материала. Таким образом, актуальной являются задачи исследования существующих геометрически нелинейных многоуровневых моделей металлов и сплавов и их развития путем учета симметричных свойств мезоуровня при формулировке кинематических и определяющих соотношений.

К общим для всех моделей для описания поведения поликристаллов относится вопрос анализа чувствительности к возмущениям параметров – оценка влияния отклонений этих величин на изменение отклика. Актуальность рассмотрения этого для моделей материалов обусловлена стохастичностью большинства их физико-механических характеристик и прикладываемых воздействий, в связи с чем к разрабатываемым для описания технологических процессов конститутивным моделям предъявляются повышенные требования по устойчивости к возмущению материальных параметров и воздействий.

Обращаясь к развитию многоуровневых моделей металлов и сплавов с целью их применения для более широких диапазонов термомеханических воздействий, отметим, что особый интерес представляет включение в них описания механизма зернограничного скольжения (ЗГС). Это необходимо для исследования

перспективных технологических процессов, основанных на использовании деформирования в режиме структурной сверхпластичности (Р.А. Васин, М.В. Грабский, Ф.У. Еникеев, О.А. Кайбышев, Р.Р. Мулюков, П.И. Полухин, М.Х. Шоршоров, И.Н. Фридляндер, и др. [140, 161]), позволяющих получать детали сложной формы малым числом технологических операций с исключением сварки. Обзор экспериментальных исследований сверхпластического деформирования, а также существующих моделей для его описания приведен в главе 6. К настоящему времени значительный вклад в исследование физических основ (структурного) сверхпластического деформирования, в частности – установление лидирующей роли механизма ЗГС, создание математических моделей описания сверхпластического деформирования, внесен упомянутыми и другими авторами (А.А. Бочвар, Р.З. Валиев, А.П. Жилев, А.А. Мазилкин, М.М. Мышляев, О.Б. Наймарк, В.Е. Панин, А.И. Пшеничнюк, В.Н. Чувильдеев, Р. Verbon, J.W. Edington, M. Furukawa, T.G. Langdon и др. [140, 161]). Необходимыми условиями для деформирования в режиме структурной сверхпластичности являются нахождение скорости деформации и температуры в определенном диапазоне, а также мелкозернистая структура материала, что обычно достигается использованием предварительной обработки методами интенсивной пластической деформации (в частности, равноканальным угловым прессованием). В источниках, описывающих эксперименты (в подавляющем большинстве – на одноосное растяжение) по сверхпластическому деформированию, отмечается стадийность кривой растяжения (стадия упруговязкопластичности с упрочнением, стадия «перехода» к структурной сверхпластичности, сам режим структурной сверхпластичности), описывается изменение ролей отдельных физических механизмов, существенное изменение структуры. Очевидно, что в технологических процессах также будут наблюдаться эти эффекты, однако автору диссертации не встречались многоуровневые модели на основе ФТП, содержащие явное описание всех значимых и взаимодействующих механизмов при сверхпластическом деформировании (и переходах между режимами).

Объектами исследования работы выступают поликристаллические металлы и сплавы с различной структурой. **Предметом исследования** являются процессы

их пластического деформирования и деформирования в режиме структурной сверхпластичности (последнее – при соответствующем состоянии структуры и осуществлении деформирования в определенных температурно-скоростных диапазонах воздействий).

Цель работы – развитие подхода, основанного на введении внутренних переменных, к построению многоуровневых геометрически и физически нелинейных моделей для описания деформирования поликристаллических металлов и сплавов, включающих явное описание изменяющихся структуры материала, определяемых ее состоянием эффективных физико-механических свойств и механизмов деформирования на различных масштабных уровнях и их взаимодействиях, и исследование с помощью созданных моделей закономерностей процессов пластического (упругопластического, упруговязкопластического) и сверхпластического деформирования.

Для достижения обозначенной цели были поставлены следующие **научные задачи**:

1. Аналитический обзор существующих подходов к построению многоуровневых моделей поликристаллических металлов и сплавов, включая определение возможностей существующих моделей и выявление имеющихся в данной области проблемных вопросов и сложностей, на основании которого – уточнение задач работы.

2. Формулировка базовой двухуровневой (мезо- и макроуровень) конститутивной упругопластической (упруговязкопластической) модели для описания деформирования поликристаллических металлов и сплавов, основанной на введении внутренних переменных и кинетических соотношений для них, необходимых для явного рассмотрения эволюционирующей структуры материала, эффективных физико-механических свойств и ключевых механизмов деформирования на мезомасштабном уровне.

3. Разработка подхода к формулировке геометрически и физически нелинейных кинематических и определяющих соотношений многоуровневых конститутивных моделей с учетом симметричных свойств на различных масштабных уровнях.

4. Проведение аналитического сопоставления различных формулировок моделей мезоуровня. Разработка и реализация процедур идентификации и верификации моделей, исследование поведения представительного объема (макро- и мезоуровней) поликристаллических металлов и сплавов при различных нагрузениях, сопоставление и анализ результатов моделирования, в том числе – изменения структуры материала.

5. Разработка методики исследования чувствительности многоуровневых моделей к входным данным (воздействиям, параметрам, начальным условиям). Применение методики для оценки чувствительности предложенных моделей.

6. Усовершенствование базовой модели путем учета ключевых механизмов процесса деформирования при расширении диапазона воздействий – создание расширенной трехуровневой модели поликристаллического материала, способной описывать как режим структурной сверхпластичности, так и переход к нему и выход из него. Идентификация и верификация модели для конкретного материала, исследование процессов простого и сложного нагружения с использованием данной модели с анализом описания действия и взаимодействия различных механизмов деформирования и эволюции структуры.

Методология и методы исследования.

Методологической базой диссертационной работы являются разработки отечественных и зарубежных ученых в области нелинейной механики и физики деформируемого твердого тела. Ключевые методы исследования основаны на аппарате многоуровневого математического моделирования, базирующегося на введении внутренних переменных и ФТП, позволяющих явным образом описывать физические механизмы деформирования и структуру материала на различных масштабных уровнях. Алгоритмы реализации моделей разработаны с применением численных методов интегрирования систем обыкновенных дифференциальных уравнений, решения систем нелинейных алгебраических уравнений, численных методов оптимизации.

Научная новизна работы заключается в разработке следующих элементов, обеспечивающих развитие подхода к построению многоуровневых моделей поликристаллических металлов и сплавов:

1. Новая формулировка геометрически и физически нелинейных кинематических и определяющих соотношений многоуровневых конститутивных моделей с учетом симметричных свойств элементов мезоуровня. Процедура согласования определяющих соотношений мезо- и макроуровня. Данные наработки могут использоваться в структуре разных классов многоуровневых конститутивных моделей металлов и сплавов (учитывающих различные механизмы деформирования).

2. Построенные на базе предложенной формулировки новые упругопластические и упруговязкопластические двухуровневые модели деформирования поликристаллических материалов, включающие описание внутризеренного дислокационного скольжения и ротаций решеток кристаллитов, позволяющие описывать изменение структуры материала. Алгоритмы реализации предложенных моделей с использованием эффективных численных схем, комплекс программ для ЭВМ. Результаты исследования процессов простого и сложного нагружения, согласующиеся с экспериментальными данными, в том числе – об изменении структуры и реализации различных механизмов деформирования. Результаты впервые проведенного аналитического и численного сопоставления различных формулировок моделей мезоуровня в составе многоуровневых конститутивных моделей.

3. Новая расширенная трехуровневая конститутивная модель для описания поведения поликристаллического материала как в режиме структурной сверхпластичности, так и перехода к нему и выхода из него, учитывающая все значимые механизмы деформирования (внутризеренное дислокационное скольжение, ротации решеток кристаллитов, зернограничное скольжение, динамическую рекристаллизацию, зернограничную диффузию) и их взаимодействие. Модель базируется на впервые созданном сценарии развития процесса неупругого формоизменения с чередованием ролей и взаимосвязями различных физических механизмов деформирования. Алгоритм реализации предложенной модели с использованием эффективных численных схем, комплекс программ для ЭВМ. Результаты исследования с использованием разработанной модели процессов простого и сложного нагружения образцов из алюминиевого

сплава 1420, согласующиеся с экспериментальными данными, в том числе – об изменении структуры и реализации механизмов деформирования.

4. Новая методика и результаты исследования чувствительности многоуровневых моделей к входным данным.

Содержание приведенных п.п.1–4 характеризуют **теоретическую значимость** работы – развитие подхода к построению многоуровневых моделей поликристаллических металлов и сплавов.

Практическая значимость работы заключается в возможности использования предложенного аппарата (многоуровневых конститутивных моделей и реализующего их комплекса программ) для исследования поведения материалов при термомеханической обработке (в частности – с использованием деформирования в режиме структурной сверхпластичности), необходимого для совершенствования существующих и создания новых технологий обработки материалов методами интенсивного деформирования.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Подход к формулировке геометрически и физически нелинейных кинематических и определяющих соотношений многоуровневых конститутивных моделей с учетом симметричных свойств мезоуровня.

2. Двухуровневые конститутивные модели упругопластического и упруговязкопластического деформирования поликристаллических материалов, включающие описание внутризеренного дислокационного скольжения и ротаций решеток кристаллитов. Результаты моделирования процессов простого и сложного нагружения, в том числе – данные об изменении структуры и реализации механизмов деформирования. Результаты аналитического и численного сопоставления различных формулировок подмоделей мезоуровня, используемых в многоуровневых конститутивных моделях.

3. Расширенная трехуровневая модель поликристаллического материала, способная описывать как режим структурной сверхпластичности, так и переход к нему и выход из него, учитывающая все значимые механизмы деформирования (внутризеренное дислокационное скольжение, ротации решеток кристаллитов, зернограничное скольжение, динамическую рекристаллизацию, зернограничную

диффузию) и их взаимодействие. Результаты исследования с использованием предложенной модели деформирования процессов простого и сложного нагружения образцов из алюминиевого сплава 1420, согласующиеся с экспериментальными данными, в том числе – об изменении структуры и реализации различных механизмов деформирования.

4. Методика исследования чувствительности многоуровневых моделей к входным данным. Результаты ее применения для предложенных моделей.

Достоверность и обоснованность результатов подтверждается удовлетворительным соответствием результатов численного моделирования экспериментальным данным, результатами численных экспериментов по устойчивости и сходимости решения.

Апробация работы. Результаты диссертационной работы представлялись автором в устных докладах на Всероссийских и Международных конференциях: Всероссийский съезд по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики (Казань, 2015, Уфа, 2019), Зимняя школа по механике сплошных сред (Пермь, 2011, 2013, 2015, 2017, 2019), «Перспективные материалы с иерархической структурой для новых технологий и надежных конструкций» (Томск, 2013, 2015, 2016, 2017), «Механика, ресурс и диагностика материалов и конструкций» (Екатеринбург, 2012, 2014, 2016, 2018), «Актуальные проблемы механики» (Санкт-Петербург, 2015), World Congress on Computational Mechanics (Барселона, 2014), International Conference on Material Modelling (Варшава, 2013, Рим, 2017), European Mechanics of Materials Conference (Брюссель, 2016, Нант, 2018), European Solid Mechanics Conference (Мадрид, 2015), International Conference on Computational Plasticity (Барселона, 2019). Работа полностью докладывалась и обсуждалась на семинарах кафедры математического моделирования систем и процессов ПНИПУ (руководитель – д.ф.-м.н., проф. П.В. Трусов), Института механики сплошных сред УрО РАН (руководитель – академик РАН, д.т.н., проф. В.П. Матвеев), кафедры композиционных материалов и конструкций ПНИПУ (руководитель – д.т.н., проф. А.Н. Аношкин).

Публикации. По теме диссертации опубликовано 70 печатных работ, из них 18 [126–129, 138, 140–143, 145, 146, 161, 164, 167–171] – в ведущих научных

журналах, входящих в перечень рецензируемых научных изданий, установленный Министерством науки и высшего образования Российской Федерации для представления результатов докторских диссертаций (из них 8 вошли в переводную версию журнала, индексируемую в Web of Science и Scopus), 5 статей – в журналах, индексируемых в базе данных Web of Science и/или Scopus [137, 405, 406, 427, 431], 9 статей – в сборниках материалов конференций, индексируемых в международных базах цитирования Scopus и/или Web of Science [365, 366, 401, 402, 407, 426, 428–430]; получено 3 свидетельства о государственной регистрации программы для ЭВМ [50, 160, 162].

Личный вклад автора. Автором или с его непосредственным участием получены все включенные в диссертацию результаты: аналитический обзор литературы по тематике работы, постановки на его основе задач работы, обоснование и формулировка основных положений, определяющих научную новизну и практическую значимость исследования, разработка алгоритмов численной реализации предложенных моделей, создание комплексов программ, проведение вычислительных экспериментов, анализ и обобщение аналитических и численных результатов моделирования, формулировка выводов.

Связь исследований с научными программами. Работы по тематике диссертации проводились при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования (базовая часть государственного задания ПНИПУ, проект 9.7434.2017/8.9), Программы поддержки молодых ученых (гранты Президента РФ МК-3989.2012.1, МК-4485.2014.1), Российского научного фонда (проект 17-19-01292), Российского фонда фундаментальных исследований (проекты 12-08-01052, 12-08-33082, 14-01-00069, 15-08-06866, 17-01-00379, 17-41-590694).

Благодарности. Автор выражает глубокую признательность своим родным и близким, благодарность и уважение научному консультанту и учителю Петру Валентиновичу Трусову, соавторам и коллегам Эльвире Ривгатовне Шарифуллиной, Никите Сергеевичу Кондратьеву, Антону Юрьевичу Янцу, а также другим сотрудникам кафедры математического моделирования систем и процессов.

Структура и объем диссертации. Диссертационная работа состоит из введения, списка сокращений и основных обозначений, шести глав, заключения, списка использованной литературы. Работа изложена на 302 страницах, содержит 66 рисунков и 6 таблиц. Список литературы включает 467 наименований.

Первая глава посвящена анализу современного состояния в области моделирования неупругого деформирования моно- и поликристаллических металлов и сплавов. В п.1.1 приводится информация об основных подходах к формулировке определяющих соотношений (макрофеноменологическом, термодинамическом, структурно-механическом, физическом). В п.1.2 подробно описывается формализм подхода, основанном на явном введении в структуру определяющих соотношений внутренних переменных, отражающих текущее состояние мезо- и микроструктуры, и формулировке на базе сведений из физики твердого тела и материаловедения эволюционных уравнений для этих параметров. В п.1.3 приводится краткий обзор способов построения многоуровневых моделей материалов в рамках указанного подхода, предложенных отечественными и зарубежными учеными, обозначены основные нерешенные вопросы, возникающие при построении многоуровневых моделей поликристаллических металлов и сплавов.

Во второй главе приводится базовая двухуровневая статистическая конститутивная модель неупругого деформирования поликристаллов, в п.2.1 описывается ее структура, в п.2.2 содержится описание соотношений для определения скорости неупругого деформирования кристаллита за счет внутризеренного дислокационного скольжения.

В третьей главе описывается предлагаемый подход к формулировке кинематических и определяющих соотношений с учетом симметричных свойств мезоуровня. В п.3.1 рассматриваются некоторые нерешенные проблемы построения геометрически нелинейных моделей МДТТ. В п.3.2 описывается предлагаемый подход к построению кинематических и скоростных определяющих соотношений для поликристаллических металлов и сплавов при больших градиентах перемещений, основанный на использовании многоуровневого моделирования.

В четвертой главе рассмотренные выше формулировки соотношений мезоуровня сопоставляются с известными моделями ФТП (п.4.1); приведены полная постановка задачи моделирования представительного объема с использованием предложенной формулировки модели мезоуровня в скоростях в актуальной конфигурации и постановка краевой задачи для описания технологических процессов с использованием этой конститутивной модели материала (4.2).

Пятая глава посвящена рассмотрению алгоритма численной реализации двухуровневой модели (п.5.1), описанию и анализу численных результатов моделирования неупругого деформирования представительных объемов материала (п.5.2), оценке чувствительности моделей к входным данным (п.5.3).

В шестой главе описывается расширение базовой модели – трехуровневая модель, учитывающая механизм зернограничного скольжения и позволяющая описывать деформирование в режиме структурной сверхпластичности. В п.6.1 приводится обзор экспериментальных исследований сверхпластического деформирования, а также существующих моделей для его описания; в результате анализа и консолидации экспериментальных данных, имеющихся в литературе, предложен «сценарий», реализующийся во время одноосного испытания с переходом в режим структурной сверхпластичности. В п.6.2 содержится описание соотношений предложенной трехуровневой модели, включающей все ключевые физические механизмы деформирования и учитывающей их взаимодействия. В п.6.3 приведено описание процедуры идентификации, результаты идентификации и верификации предложенной модели (для одноосного растяжения), представлены результаты моделирования для других видов нагружения (простого сдвига, сложного нагружения).

Сокращения

- ВДС – внутризеренное дислокационное скольжение
- ГНД – геометрически необходимые дислокации
- ГЦК, ГПУ, ОЦК – гранцентрированная кубическая, гексагональная плотноупакованная, объемно-центрированная кубическая (кристаллические решетки)
- ДОН – дислокации ориентационного несоответствия
- ЗГД – зернограничные дислокации
- ЗГС – зернограничное скольжение (проскальзывание)
- ИТН – изображающая точка в пространстве напряжений
- КСК – кристаллографическая система координат
- ЛСК – (фиксированная) лабораторная система координат
- МДТТ – механика деформируемого твердого тела
- МКЭ – метод конечных элементов
- МСС – механика сплошной среды
- НДС – напряженно-деформированное состояние
- ОДУ – обыкновенное дифференциальное уравнение
- ОС – определяющие соотношения
- ПО – представительный объем
- ПСК – подвижная система координат
- РД – решеточные дислокации
- СНД – статистически накопленные дислокации
- СП – сверхпластичность
- СПД – сверхпластическое деформирование
- СС – система скольжения
- ТДС – термодинамическая система
- ТМО – термомеханическая обработка
- ТОС – теория определяющих соотношений
- ТПТ – теория пластического течения
- ФРО – функция распределения ориентаций
- ФТП – физическая теория пластичности

ФТТ – физика твердого тела

ЭДУ – энергия дефекта упаковки

ЭУ – эволюционные уравнения

Основные обозначения

B – тело

$(\cdot)^{cr}, (\cdot)^{CR}$ – обозначения коротационных производных на мезо- и макроуровне

$D_u (d_u)$ – интенсивность тензора деформации скорости макроуровня (мезоуровня)

G – модуль Юнга

$I_1(\cdot), I_2(\cdot), I_3(\cdot)$ – главные инварианты тензоров второго ранга

k – константа Больцмана

K_0, K_t – отсчетная и текущая (актуальная) конфигурации

$\overset{\times}{K}$ – промежуточная (разгруженная решеточная) конфигурация

N – скорость совершения работы

P – субтело (подтело) тела B

$Q(q)$ – мощность внутреннего теплового источника макроуровня (мезоуровня)

$\mathbb{R}^n - n$ – мерное евклидово пространство

t – время (или неубывающий параметр, его заменяющий)

T_r – гомологическая температура (отношение абсолютной температуры частицы к температуре плавления материала)

$\dot{\gamma}^{(k)}$ – скорость сдвига в k -й системе скольжения

$\Theta(\theta)$ – абсолютная температура (K) макроуровня (мезоуровня)

$\overset{o}{\rho}, \hat{\rho}$ – плотность в отсчетной и актуальной конфигурации

σ_s – предел текучести (или напряжение течения)

$\tau^{(k)}, \tau_c^{(k)}$ – сдвиговое напряжение и критическое напряжение сдвига в k -й системе скольжения

ϕ – система отсчета («наблюдатель»)

\mathbf{b}, b – вектор Бюргера дислокации и его модуль

$\overset{o}{\mathbf{e}}_i \left(\overset{o}{\mathbf{e}}^i \right), \hat{\mathbf{e}}_i \left(\hat{\mathbf{e}}^i \right)$ – векторы основного (сопряженного) базисов в K_0 и K_t

соответственно

\mathbf{f} – интенсивность массовых сил (на единицу массы)

$\overset{\circ}{\mathbf{p}}_i, \hat{\mathbf{p}}_i$ – главные векторы мер Коши–Грина и Альманси

\mathbf{R}_0, \mathbf{r} – радиус – вектор частицы в отсчетной и текущей конфигурации

$\hat{\mathbf{t}}, \overset{\circ}{\mathbf{t}}$ – интенсивность (на единицу площади) поверхностных сил в актуальной и отсчетной конфигурации

$\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w}$ – векторы перемещений, скоростей перемещений и ускорений

$\overset{\circ}{\nabla}, \hat{\nabla}$ – операторы Гамильтона (набла–операторы) в отсчетной и актуальной конфигурации

$\mathbf{A}(\mathbf{a}), \mathbf{C}(\mathbf{c})$ – тензоры деформаций Альманси и Коши–Грина макроуровня (мезоуровня)

$\mathbf{D}, \mathbf{D}^e, \mathbf{D}^p$ – тензор деформации скорости, его упругая и пластическая составляющие (макроуровень)

$\mathbf{d}, \mathbf{d}^e, \mathbf{d}^p$ – тензор деформации скорости, его упругая и пластическая составляющие (мезоуровень)

$\mathbf{D}', \mathbf{D}'^e, \mathbf{D}'^p$ – девиаторы тензоров деформации скорости, его упругой и пластической составляющих (макроуровень)

$\mathbf{d}', \mathbf{d}'^e, \mathbf{d}'^p$ – девиаторы тензоров деформации скорости, его упругой и пластической составляющих (мезоуровень)

\mathbf{E}, \mathbf{I} – единичный тензор второго ранга

$\mathbf{F}(\mathbf{f})$ – градиент деформации (транспонированный градиент места) макроуровня (мезоуровня)

$\overset{\circ}{\mathbf{G}}, \hat{\mathbf{G}}$ – меры деформации Коши–Грина и Альманси

$\hat{\mathbf{g}}$ – мера Фингера (левый тензор деформаций Коши – Грина)

$\overset{\circ}{\mathbf{H}}, \hat{\mathbf{H}}$ – логарифмические тензоры макродеформаций (Генки) в K_0 и K_t

$\mathbf{K}(\mathbf{k})$ – второй тензор Пиола–Кирхгоффа макроуровня (мезоуровня)

$\mathbf{K}(\mathbf{k})$ – взвешенный тензор Кирхгоффа макроуровня (мезоуровня)

$\mathbf{I}^{(i)}, \mathbf{I}^{(i)}$ – тензор 2-го ранга и вектор плотности (на единицу массы) внутренних моментов количества движения (в K_t)

L (\mathcal{L}) – (транспонированный) градиент скорости перемещений макроуровня (мезоуровня)

$\mathbf{m}^{(k)}$ – ориентационный тензор k -й системы скольжения, $\mathbf{m}_{(S)}^{(k)}$, $\mathbf{m}_{(A)}^{(k)}$ – его симметричная и антисимметричная части

\mathbf{P} – первый тензор (напряжений) Пиола–Кирхгоффа

$\mathbf{R}(\mathbf{r})$ – ортогональный тензор, сопровождающий деформацию макроуровня (мезоуровня)

\mathbf{r} – ортогональный тензор, описывающий ротацию подвижной системы координат, связанной с решеткой кристаллита

$\mathbf{S}(\mathbf{s})$ – девиатор тензора напряжений Коши макроуровня (мезоуровня)

$\mathbf{U}, \mathbf{V}(\mathbf{u}, \mathbf{v})$ – левый и правый тензоры искажения макроуровня (мезоуровня)

$\mathbf{W}(\mathbf{w})$ – тензор вихря макроуровня (мезоуровня)

$\mathbf{Z}, \mathbf{Z}^e, \mathbf{Z}^{in}, \mathbf{Z}^{th}$ – тензор скорости деформации, его упругая, неупругая и термическая составляющая (макроуровень)

$\mathbf{z}, \mathbf{z}^e, \mathbf{z}^{in}, \mathbf{z}^{th}$ – тензор скорости деформации, его упругая, неупругая и термическая составляющая (мезоуровень)

$\overset{\circ}{\nabla} \mathbf{r}, \hat{\nabla} \mathbf{R}_0$ – градиенты места, определенные в отсчетной и актуальной конфигурациях

$\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\varepsilon})$ – тензор малых деформаций макроуровня (мезоуровня)

$\mathbf{\Pi}(\mathbf{\Pi})$ – тензор упругих свойств макроуровня (мезоуровня)

$\boldsymbol{\Sigma}(\boldsymbol{\sigma})$ – тензор напряжений Коши макроуровня (мезоуровня)

$\boldsymbol{\Omega}(\boldsymbol{\omega})$ – тензоры спина макроуровня (мезоуровня)

$\boldsymbol{\epsilon}$ – тензор Леви – Чивита

1. Анализ современного состояния моделирования неупругого деформирования моно- и поликристаллических металлов и сплавов: подходы и проблемы

Для развития технологий термомеханической обработки (ТМО) материалов и изделий необходим аппарат для адекватного математического моделирования происходящих процессов деформирования, сопровождающихся существенным изменением структуры материала. Ключевым компонентом этого аппарата являются конститутивные модели (определяющие соотношения) для описания поведения материала. В п.1.1 приводится краткая информация об основных подходах к формулировке определяющих соотношений (ОС) МДТТ (макрофеноменологическом, термодинамическом, структурно-механическом, физическом) и обосновывается, что для создания указанного аппарата предпочтительно использовать физический подход с явным учетом механизмов деформирования и изменяющегося состояния структуры материала. В п.1.2 подробно описывается формализм данного подхода, основанный на явном введении в систему ОС внутренних переменных, отражающих текущее состояние мезо- и микроструктуры, и формулировке на базе сведений из физики твердого тела (ФТТ) и материаловедения эволюционных уравнений для этих параметров. Краткий обзор многоуровневых моделей материалов в рамках указанного подхода, созданных отечественными и зарубежными учеными, представлен в п.1.3, обозначены основные нерешенные вопросы, возникающие при построении моделей данного класса, связанные в первую очередь со сложностью построения моделей на стыке механики и ФТТ. В главе приводится краткий обзор, ознакомиться в более полном объеме с информацией о содержащихся в литературных источниках описаниях многоуровневых моделей ФТП можно будет в проходящей редакционную подготовку монографии (П.В.Трусов, А.И. Швейкин. Многоуровневые модели моно- и поликристаллических материалов: теория, алгоритмы, примеры применения. – Новосибирск: Изд-во СО РАН. – ориентировочный объем 680 с.).

Для лучшего структурирования текста диссертации обзор моделей сверхпластичности всех упомянутых классов вынесен отдельно в п.6.1, а обзор подходов к формулировке геометрически нелинейных проблем МДТТ в основном содержится в п.3.1, хотя о соответствующей проблеме упоминается и в данной главе.

1.1. Основные подходы к формулировке определяющих соотношений

Кратко рассмотрим основные подходы к формулировке ОС для неупругого деформирования твердых тел (изложение в основном опирается на работы [135, 144]), анализируя их возможности с точки зрения применимости для задач исследования процессов ТМО, сопровождающихся существенным изменением структуры материала.

Выделяют следующие наиболее применяемые исследователями подходы: феноменологический макроскопический (макрофеноменологический), структурно-механический (имитационный), термодинамический, физический. Как и исследования в естественных науках в целом, все указанные подходы базируются на феноменологическом рассмотрении объектов, процессов и явлений на различных структурных (уровнях реализации механизмов процесса) и масштабных уровнях. Стоит заметить, что явно или неявно при формулировке «феноменологических» соотношений используется известная информация о физической природе явления, в противном случае, трактуя феноменологический подход сугубо как эмпирическое рассмотрение «входов» и «выходов» «черного ящика», нельзя было бы надеяться на создание корректных уравнений, поскольку число вариантов математического описания процессов и явлений – бесконечно большое. С другой стороны, по причине неполноты информации объект в определенной степени остается «черным ящиком», поскольку исследователь никогда не обладает абсолютно полными и истинными знаниями о происходящих явлениях [3]. В связи с этим, а также вследствие того, что при применении одного из указанных подходов часто используются элементы другого, говорить о конкретном используемом при создании ОС подходе можно только условно [135].

Большая часть моделей МДТТ сформулирована с использованием *макрофеноменологического подхода*. Обычно в его рамках, отталкиваясь от экспериментальных данных для макрообразцов и физического анализа на качественном уровне, исследователи вводят основные элементы теории (понятия, определения, гипотезы), предлагают некоторый общий вид ОС, осуществляют конкретизацию уравнений для частных случаев, создают программу макроэкспериментов для идентификации (определения параметров ОС принятого вида) и верификации модели. Таким образом, важнейшим элементом данного подхода являются макроэксперименты.

К числу макрофеноменологических теорий неупругого деформирования твердых тел относятся многие модели пластичности (например, классическая теория пластического течения (ТПТ), изложенная в большинстве классических монографий по МДТТ, например, в [31, 120 и др.]; различные модификации ТПТ [34, 37, 87, 227, 357 и др.]; теория упругопластических процессов А.А. Ильюшина [33] и ее частные формы, включая теорию малых упругопластических деформаций; эндохронная теория пластичности [36, 434, 435, и др.]); теории вязкопластичности, теории вязкоупругости, теории ползучести (модели трех последних классов описываются, например, в монографиях [44, 91]) и другие. Макрофеноменологические ОС наиболее часто применяются при решении большей части прикладных задач МДТТ, в частности, множество моделей материалов именно этого класса используются во всех популярных коммерческих пакетах для решения краевых задач методом конечных элементов.

Обратимся к определению ОС; согласно [135] это – «ограничения (связи), накладываемые на параметры кинематического, динамического и термодинамического типов (соответствующего уровня) и историю их изменения. Данные связи на рассматриваемом уровне являются целевым отражением исследуемых свойств среды, описывающим взаимодействие частиц (молекул, атомов и т. д.) и эволюцию «носителей» механизмов анализируемого процесса в реальном материале». Таким образом, как и любая математическая модель [3], ОС наделено свойством целеполагания. Поэтому, отмечая огромное значение для развития МДТТ макрофеноменологических ОС, обозначим далее сложности в их

применении для цели детального исследования и усовершенствования технологий ТМО.

1) Ключевым фактором всех процессов такой обработки, как уже отмечено выше, является существенное изменение структуры материала на различных масштабных уровнях. Известно, что практически любые пластические деформации приводят к текстурообразованию [18, 324], что вызывает изменение симметричных свойств. Многие процессы, например, равноканальное угловое прессование, кручение под высоким давлением [12, 13, 119] нацелены именно на изменение структуры материала: в результате измельчения зеренной структуры существенно улучшаются прочностные свойства. В макрофеноменологических моделях нет возможности описания эволюции структуры, соответственно, *нет возможности описания формирующихся физико-механических свойств материала (как следствие – и изделия) после ТМО.*

Обратим внимание также на то, что обязательным элементом экспериментального исследования является идентификация начального состояния структуры, поскольку «номинально» один и тот же (по химическому составу) материал после разных процессов предварительной ТМО (при разных способах изготовления) может проявлять существенно отличающиеся свойства. Следует отметить, что в последние годы при проведении макроэкспериментов попутно проводится и исследование изменения микроструктуры, однако в рамках макрофеноменологического подхода последние используются только для качественной оценки начальных предположений о физическом характере процесса.

При отсутствии неупругих деформаций ситуация проще, изменение структуры не происходит, либо осуществляется хрупкое постепенное разрушение материала, которое можно описать ростом скалярной характеристики поврежденности. Развита аналитическая статистическая теория, позволяющая определять НДС структурно-неоднородных сред в таких ситуациях путем рассмотрения упругих соотношений на различных масштабных уровнях с учетом структуры материала на них (в частности, в работах уральской школы механиков, основанной С.Д. Волковым – Ю.В. Соколкиным, А.А. Ташкиновым, В.Э.

Вильдеманом [17, 123 и др.]). Стоит отметить, что в данных моделях рассматриваются одни и те же физические механизмы деформирования (упругость, структурное разрушение – деградация упругих свойств) на различных масштабных уровнях, что представляется приемлемым для анализа эксплуатационных свойств композиционных материалов (но не для процессов неупругого деформирования металлов).

2) Значительное изменение структуры материала при неупругом деформировании, различное при разных воздействиях (в технологических процессах ТМО реализуются существенно отличающиеся воздействия в разных частях изделия), определяет сложность поведения материала. В частности, гипотеза единой кривой, в том или ином виде принимаемая в некоторых макрофеноменологических моделях (в явном виде – в классической ТПТ, в теории А.А.Ильюшина ее расширенным аналогом можно назвать постулат изотропии [33]), не выполняется при больших деформациях (об этом свидетельствуют экспериментальные данные, приводимые в статьях, цитируемых в п.1.3). Тогда макрофеноменологическое ОС, пригодное для моделирования процессов термообработки, должно представлять собой достаточно сложный оператор, включающий в себя либо выбор частных соотношений для реализуемых нагрузжений (например, в рамках теории упруго-пластических процессов А.А.Ильюшина [33]), либо содержать аппроксимацию экспериментальных данных для различных воздействий (видов нагрузжений) за счет введения соответствующих материальных функций [62]. В современных модификациях ТПТ учет изменения структуры пытаются осуществить за счет определения сложного закона (неизотропного и кинематического) упрочнения, что фактически тоже представляет собой аппроксимацию экспериментальных данных. В силу многообразия вариантов изменения структуры в случае существенной вариативности истории воздействий, что характерно для технологических процессов, такой путь представляется не вполне конструктивным. Таким образом, для использования макрофеноменологических моделей для исследования процессов ТМО *необходимо проведение экспериментов для большого числа*

(строго говоря, бесконечно) вероятных траекторий нагружения и учета полученных данных в операторе модели.

В связи с этим существенной актуальностью обладают эксперименты на сложное нагружение, но, к сожалению, известные (автору) эксперименты на сложное нагружение тонкостенных трубчатых образцов уже в 3-мерной проекции пространства напряжений (независимые параметры – давление, закручивающие и растягивающие усилия) ограничены малыми деформациями (на сдвиг – не более 5 – 7%) [1, 14, 15, 30 и др.], что вызвано ранней потерей устойчивости образцов. К настоящему моменту не решена задача разработки экспериментальной методики, позволяющей осуществлять эксперименты для общего случая деформирования (в 5- или 6-мерном пространствах напряжений и/или деформаций).

3) Поскольку в технологических процессах ТМО металлов и сплавов наблюдаются большие градиенты перемещений, необходима геометрически нелинейная постановка соответствующих краевых задач.

Существенный вклад в развитие методологии построения макрофеноменологических нелинейных моделей МДТТ внесли многие ученые: Г.Л. Бровка [10], П.А. Жилин [27], А.А. Ильюшин [33], В.И. Кондауров [45], А.В. Коновалов [51], С.Н. Коробейников [52], В.Н. Кукуджанов [54], В.И. Левитас [57], А.И. Лурье [64], А.А. Маркин [74], Ю.И. Няшин [103], А.А. Поздеев [103], А.А. Роговой [1085], Л.И. Седов [120], П.В. Трусов [103], А. Bertram [204], O.T. Bruhns [220], Y.F. Dafalias [232], A.E. Green [265], G. Jaumann [289], J. Mandel [339], P.M. Naghdi [265], W. Noll [425], M.V. Rubin [389], C. Trusdell [425], H. Xiao [451], S. Zaremba [458] и др. При этом подавляющее число известных работ посвящено формулировке ОС для упруго-изотропных материалов. Однако, как отмечено выше, из-за образования и изменения текстуры симметричные свойства макроуровня эволюционируют. Предлагаемые в ряде работ макрофеноменологические упруго-анизотропные соотношения либо по существу формулируются в терминах отсчетной конфигурации, когда возникает вопрос их обоснования, особенно – при действии множества взаимосвязанных механизмов деформирования, в связи со сложностью трактовки физического смысла мер НДС (например, [203, 221]), либо не принимают во внимание текстурирование

(например, [185, 186, 228, 231, 232, 390, 432]); более подробный обзор по вопросу формулировки геометрически-нелинейных моделей МДТТ представлен в п.3.1. Таким образом, по мнению автора, *вопрос построения геометрически нелинейных моделей МДТТ для анизотропных материалов при неупругом деформировании с изменяющимися симметричными свойствами не является полностью решенным.*

Поскольку текстуробразование и изменение симметричных свойств существенным образом и нелинейно зависит от нагружения, являясь отражением действия механизмов деформирования на низших масштабных уровнях, решение указанного вопроса в рамках макрофеноменологического подхода затруднено упомянутой в п.2 необходимостью проведения (строго говоря, бесконечно) множества экспериментов.

Таким образом, можно заключить, что *макрофеноменологические ОС* как математические модели могут и должны применяться для исследования поведения материала при определенных условиях и воздействиях (конкретный вид нагружения, конкретное начальное состояние материала), однако *упомянутые сложности ограничивают их применение для технологических процессов ТМО*, когда могут реализовываться существенно различные воздействия, определяя разные сценарии действия и взаимовлияния механизмов деформирования и изменения структуры на низших масштабных уровнях. Это согласуется с общими принципами построения математических моделей физических процессов и явлений [3], согласно которым «всё следует упрощать до тех пор, пока это возможно, но не более того» (формулировка А.Эйнштейна методологического принципа «Бритва Оккама»).

Значительное число моделей предложено в рамках *структурно-механического (структурного, имитационного) подхода*, когда достаточно сложные ОС строятся из набора элементарных моделей. В рамках данного подхода сначала строится модель материала для одноосного нагружения. На основе физического анализа и экспериментальных данных исследователь задает набор элементарных «структурных элементов» (моделей), соответствующих реализации разных механизмов деформирования (упругие пружины, элементы сухого и вязкого трения, иногда вводятся и более сложные элементы), создает

структурную схему для поведения материала как системы различными способами соединенных элементов, на ее основе формулируются одноосные ОС как связи между интегральными воздействиями и откликом, создается и реализуется программа идентификации модели. С использованием дополнительных гипотез выполняется обобщение модели на трехмерный случай. В финале осуществляется верификация модели на экспериментах, в том числе – со сложным нагружением. К теориям этого типа относятся модели Мазинга, Максвелла, Бингама, Фойгта и др. (описание множества моделей приведено в монографиях [35, 44, 91]).

Имитационный и макрофеноменологический подходы имеют много общего (физический анализ, макроэксперименты) [135]. Структурно-механический подход часто используется на стадии предварительного рассмотрения в макрофеноменологическом подходе для определения вида ОС; с другой стороны, для известных макрофеноменологических ОС часто строятся соответствующие структурно-механические модели, позволяющие придать более ясный физический смысл уравнениям и входящим в них параметрам. Очевидно, что *в плане создания моделей, применимых для описания технологических процессов ТМО, имитационному подходу присущи такие же сложности, как и обозначенные выше для макрофеноменологического.*

Термодинамический подход к формулировке ОС базируется на конструктивном использовании законов и соотношений термодинамики (классической и неравновесной). ПО рассматривается как термодинамическая система (ТДС), для которой вводятся термодинамические параметры (параметры состояния), потенциалы, определяющие состояние ТДС [135]. Общий вид ОС и кинетических уравнений для термодинамических параметров определяется с использованием второго закона термодинамики (обычно в виде неравенства Клаузиуса – Дюгема) и условия независимости термодинамических параметров. Для определения конкретной формы уравнений необходимо сформулировать используемые термодинамические потенциалы в явной форме, для чего выдвигаются дополнительные гипотезы физического характера, используются методы статистической физики и неравновесной термодинамики. На

завершающем этапе проводятся эксперименты для идентификации и верификации модели.

К настоящему моменту предложено значительное количество ОС данного типа для описания неупругого деформирования металлов и сплавов, известны модели А.А. Маркина [73], О.Б. Наймарка [80], J. Casey [223], P. Germain [262], M.E. Gurtin [269], G.A. Maugin [344] и других исследователей. Заметим, что во многих моделях используются параметры состояния, связанные с характеристиками структуры материала, т.е. используются элементы описанного ниже физического подхода (хотя и не в полной мере).

К преимуществам термодинамического подхода можно отнести строгий формализм процедуры построения ОС и автоматическое выполнение термодинамических ограничений (отметим, что их следует проверять для любых конститутивных моделей). Затруднения в применении термодинамического подхода обусловлены неоднозначностью обоснованного выбора термодинамических параметров и конкретного вида термодинамического потенциала, фактически на эти вопросы переносится центр тяжести проблемы формулировки ОС [135]. *Создание (обладающих ясным физическим смыслом) термодинамических потенциалов для описания поведения материала при существенно различных воздействиях при ТМО представляется крайне трудным процессом.*

Кроме того, *характерны и обозначенные выше для макрофеноменологического подхода сложности* (невозможность описания изменения структуры в полной мере, ограниченность экспериментальных исследований сложных нагружений с большими градиентами перемещений, проблемы с формулировкой геометрически нелинейных соотношений для материала с изменяющимися симметричными свойствами). Действительно, представляется нерешаемой задача построения модели из общих для всех материалов термодинамических принципов без включения в модель описания конкретной физики процессов деформирования рассматриваемого материала. По существу, она закладывается в термодинамические потенциалы, функции и

характеристики (например, в диссипативную функцию, используемую во втором законе термодинамики).

Теории пластичности, созданные в рамках трех вышеприведенных подходов, обычно называются в литературе по МДТТ математическими, поскольку формулировки осуществляются в терминах континуальной механики, полей напряжений, деформаций и других параметров.

В последние десятилетия активно ведутся работы по построению ОС в рамках *физического подхода*, когда в модели материала явно рассматриваются процессы и механизмы на меньших, чем макроскопический, масштабных уровнях (мезоскопическом, микроскопическом и атомном) [135]. Построение ОС начинается с тщательного физического анализа исследуемого процесса (деформирования, течения), определения механизмов процесса на различных масштабных уровнях и объектов, их реализующих («носителей» механизма), введения соответствующих параметров. Большое внимание при этом уделяется рассмотрению дефектов кристаллической решетки (вакансий, межузельных атомов, дислокаций, дисклинаций), анализу микроструктуры материалов. В силу огромного количества микродефектов в кристаллических телах при построении ОС часто используют их континуальное представление (например, тензор плотности дислокаций, сдвиги по системам скольжения кристаллита). После этого устанавливаются законы взаимодействия для параметров, описывающих указанные «носители» механизмов деформирования, записываются эволюционные уравнения для них (часто — для их континуального аналога) [135]. Для перехода к макромасштабным характеристикам осуществляется та или иная процедура осреднения по представительным объемам (ПО) на соответствующих масштабных уровнях. На финальной стадии осуществляется процедура идентификации и верификации модели.

К числу условных недостатков подхода можно отнести сложность описания эволюции дефектной структуры в терминах полевых переменных (фактически для этого используется феноменологический подход; однако в отличие от макрофеноменологической формулировки феноменологическое рассмотрение осуществляется на основе детального анализа физических механизмов для

конкретных объектов на определенном низшем уровне модели, а не для системы в целом), большое количество переменных и уравнений для них (но достаточно простой вид уравнений, см. п.1.2), сложность постановки и проведения прямых экспериментов на микро- и мезоуровнях для пространственных тел (хотя в последние десятилетия наблюдается существенное развитие соответствующих экспериментальных методик; кроме того, возможна оценка состояния структуры поликристаллов в целом, например, анализ полюсных фигур для определения функции распределения ориентаций). Применение моделей данного класса до определенного времени сдерживалось недостаточными возможностями вычислительной техники, однако в связи с существенным увеличением компьютерных мощностей в последние годы развитие данного направления происходит весьма интенсивно. В качестве основных преимуществ подхода можно отметить возможность явного описания изменения структуры, упрощение формулировки соотношений конститутивной модели (выполняется декомпозиция сложной системы на отдельные элементы), значительную универсальность (если заложено соответствующее реальной картине описание механизмов деформирования, то с одним и тем же набором параметров модели можно адекватно описывать процессы деформирования при различных воздействиях), возможность привлечения экспериментальной информации об изменении структуры для идентификации и верификации модели.

В соответствии с приведенной информацией именно *физический подход представляется наиболее пригодным для создания ОС материалов, подходящих для описания процессов ТМО*, характеризующихся изменением структуры (реализуется явное описание) и большими деформациями.

Под физическими теориями пластичности (ФТП) далее будет пониматься широкий класс теорий пластичности, в основе формулировок ОС, гипотез и основных положений которых лежит рассмотрение в явной форме механизмов деформирования на мезо- и, в некоторых случаях, микромасштабах. Важным элементом ФТП является описание внутризеренного дислокационного скольжения (ВДС) на уровне отдельного кристаллита, в связи с чем в англоязычной литературе для ФТП используется название «*crystal plasticity*».

Возникновение и развитие ФТП как отдельной ветви теории пластичности связано с пионерскими работами Дж. И. Тейлора, К.Ф. Элам [416, 417] и Г.О. Закса [342, 394], предложивших первые жестко-пластические модели. С этого времени появилось огромное количество различных вариантов физических теорий, но практически во всех из них наблюдаются «родовые признаки» теорий указанных авторов, в особенности – Дж. И. Тейлора (вкладу Дж.И.Тейлора в становление и развитие ФТП посвящена статья Дж.Ф.Белла [199]). Дальнейшее развитие ФТП было определено работами Дж.Ф.Бишопа, Р.Хилла [211, 212], предложивших жесткопластическую модель, Т.Г. Линя [59, 332], Г.Дж.Венга [444, 445] – упругопластические модели, Дж.В.Хатчинсона [284, 285], Р.Дж. Азаро, А. Нидлмана [191, 192] – упруговязкопластические модели. Обзор основополагающих и более поздних работ ФТП моделей содержится в п.1.3, здесь остановимся на некоторых работах, не содержащих модели ФТП в указанном выше смысле, но имеющих существенное значение для развития моделей данного класса.

В значительной мере усовершенствование физических моделей стало возможным благодаря развитию представлений ФТТ о процессах, происходящих в деформируемом твердом теле. Большой вклад в это внесен работами В.В.Рыбина и коллег [115–117], В.Е. Панина и коллег [93–95, 98, 100, 101], в которых рассмотрены многие вопросы, в частности, связанные с зарождением и распространением дисклинаций от границ зерен, поворотами кристаллических решеток в результате несовместности скольжения дислокаций в соседствующих кристаллитах, реализацией зернограничного скольжения (ЗГС), влиянием ВДС на ЗГС, фрагментацией зеренной структуры и многие другие.

В томской научной школе В.Е.Панина в последние 20 лет успешно развивается физическая мезомеханика [94, 95]. В ее рамках [68, 92, 96, 97, 99] материал рассматривается как сложная иерархическая многоуровневая и самоорганизующаяся система, при этом отмечается ключевая роль рассмотрения процессов, происходящих на мезоуровне, причем для описания этих процессов обычно используется континуальный подход [68]. В работах [67, 70, 71] деформируемую и разрушающуюся среду предлагается рассматривать как

многоуровневую иерархическую самоорганизующуюся систему, для описания поведения которой применимы подходы и методы нелинейной динамики и синергетики. Приведены примеры применения разработанных на основе данного подхода моделей для описания пластического деформирования и разрушения различных материалов (металлов, горных пород).

Для развития физических моделей важную роль играют подмодели, применяемые на низших масштабных уровнях. Например, в [263, 279, 349, 350] содержатся обзоры (258, 308, 555, 265 источников соответственно) многоуровневых моделей для описания поведения механических систем в широком диапазоне масштабов, от электронного газа, изучаемого методами квантовой механики, до уровня макроскопических тел, для которых применяются методы механики континуума. Переход от квантовой механики к молекулярной динамике (МД) реализуется за счет построения потенциалов межатомного взаимодействия. В [349] отмечается существующий и в настоящее время «разрыв» между моделями атомарного (молекулярная динамика (МД)) и мезоуровня (ФТП), в определенной степени этот разрыв сокращается с использованием подмоделей микроуровня. С помощью моделей МД для передачи на следующий масштабный уровень (микроуровень) определяются условия зарождения дислокаций, параметры уравнений для описания диффузии точечных дефектов, силы взаимодействия различных дефектов друг с другом, скорости движения дислокаций. Наиболее часто применяемыми на микроуровне являются методы Монте-Карло, дислокационной динамики (ДД), клеточных автоматов. Значительное внимание уделено детерминированным и стохастическим континуальным моделям ДД, основанным на уравнениях реакционно-диффузионного типа. От микроуровня осуществляется переход к уровню кристаллита (мезоуровню), описание поведения которого ведется в рамках ФТП. Наиболее известные зарубежные работы по моделированию на различных масштабных уровнях указаны в списке литературы в цитируемых обзорах, дополнительно можно отметить работы отечественных ученых. В области МД обращают на себя внимание исследования А.В. Вахрушева [433], А.М. Кривцова [53]. С.Г. Псахье и коллеги предложили использовать для анализа динамических

систем метод подвижных клеточных автоматов [105]. А.Е. Волковым предложена микроструктурная модель для сплавов с эффектом памяти формы [19]. В работах М.Д. Кривилева предлагается двухуровневый подход для моделирования процессов переноса и структурообразования в металлургии – с уточнением решения макрозадачи путем решения краевых задач на мезомасштабном уровне [312].

Отдельную группу составляют модели, являющиеся, по сути, развитием теории скольжения Батдорфа – Будянского [5, 6] ([58, 77, 78, 114, 163, 388], в последней публикации содержится краткий обзор моделей данной группы). Эти модели представляется возможным назвать «физически-ориентированными» теориями пластичности, тем не менее – относящимися к классу макрофеноменологических, поскольку не рассматривается реальная структура материала, предлагается описание скольжения дислокаций «в среднем» в ПО, для чего вводятся эффективные «системы скольжения» (не совпадающие с реальными кристаллографическими в зернах) для объектов, не напрямую соответствующих зернам; стоит отметить вклад этих работ в развитие физического подхода в плане наделения соответствующим физическим смыслом соотношений на макроуровне.

В настоящей работе в качестве базы используются ФТП как модели, позволяющие описывать процессы ТМО с характерными для них большими деформациями и учетом происходящего изменения структуры. Обратим внимание на то, что принятая в МСС аксиоматика У. Нолла [124] (эквивалентная аксиоматике А.А. Ильюшина [32]) в значительной мере базируется на операторной форме ОС, в которой в качестве аргумента учитывается предыстория воздействий (строго говоря, вся, однако в силу наличия затухания памяти для твердых тел достаточно рассмотреть предысторию на некотором конечном интервале перед текущим моментом; отметим, что для жидкостей достаточно учесть предысторию на бесконечно малом интервале, т.е. скоростные характеристики воздействий [124]). Необходимость учета памяти материала проявляется в упомянутом ранее различном поведении при разных воздействиях. Очевидны сложности построения конкретных соотношений в такой форме, учитывая, что вид оператора априори не известен, причем в настоящее время

неизвестны даже сколь-нибудь общие подходы для его установления, слабо развита теория нелинейных операторов [135]. В ФТП используется альтернативная форма ОС – в виде простых алгебраических и дифференциальных уравнений, при этом сохраняется свойство памяти за счет введения необходимого набора внутренних переменных. Рассмотрим в следующем разделе более подробно формализм данного подхода.

1.2. Формализм подхода, основанного на явном введении в структуру конститутивных моделей внутренних переменных и эволюционных уравнений для этих параметров

На основе анализа известных подходов и физического описания процессов, изучаемых в современной механике сплошных сред, можно выдвинуть следующую гипотезу [4, 127, 135, 143] (изложение начальной информации о подходе в значительной мере соответствует указанным источникам): «Реакция материала в представительном объеме рассматриваемого масштабного уровня в каждый момент времени полностью определяется значениями тензорзначных термомеханических характеристик материала, конечного набора внутренних переменных, параметров физико-механических воздействий и их производных по времени требуемого порядка в исследуемый момент времени». В случае принятия этой гипотезы отклик материала будет определяться тензорзначными функциями тензорзначных параметров воздействия и внутренних переменных или достаточно простыми (например, дифференциальными) операторами. В то же время история воздействий не отбрасывается, ее «носителями» являются дополнительно вводимые параметры – внутренние переменные.

Таким образом, рассматриваемый подход основан на явном введении в структуру определяющих соотношений (ОС) параметров, описывающих состояние и эволюцию мезо- и микроструктуры (включая параметры, отражающие симметричные свойства материала), и формулировке эволюционных (кинетических) уравнений для этих параметров – внутренних переменных [185, 186, 231, 232, 267, 339, 343, 351, 380, 398, 463 и др.]. В литературе, посвященной различным теориям процессов необратимого деформирования, внутренними

переменными называют параметры, отражающие структуру и механизмы деформирования на мезо- и микроуровнях.

Вероятно, первыми работами, в которых в МДТТ было введено понятие внутренних переменных («скрытых параметров»), являются статьи [274, 380], в которых была рассмотрена структура модели так называемых «обобщенных стандартных материалов» (generalized standard materials), основанная на понятии внутренних переменных и термодинамике необратимых процессов. Дальнейшее развитие данный подход получил в работах [26, 262, 355] при формулировке вязкоупругих и упругопластических ОС с использованием термодинамического подхода. Согласно определению П. Жермена, «в любом обратимом термостатическом процессе эти параметры остаются постоянными и, следовательно, не участвуют в выражении элементарной обратимой работы» [26, с.183]. В дальнейшем в качестве «скрытых параметров» использовались, по существу, компоненты тензора необратимых деформаций. «Скрытые параметры» применялись далее при записи диссипативной функции, после чего на основе формализма линейной неравновесной термодинамики устанавливались связи между «скрытыми параметрами» и компонентами тензора напряжений Коши. С использованием полученных соотношений «скрытые параметры» исключались из рассмотрения, т.е. в окончательном виде ОС не содержали этих параметров.

Вопросы построения ОС с использованием «внутренних параметров состояния системы» затрагиваются также в работе [44]. В понятие «внутренние параметры состояния» авторы вкладывают смысл макроскопических характеристик изменяющейся структуры материала (например, статистически осредненная плотность дефектов). В дальнейшем внутренние параметры состояния использовались авторами цитируемой работы для формального вывода ОС на основе термодинамического подхода.

Детальный (342 источника) исторический обзор возникновения и развития подхода к построению конститутивных моделей, основанного на понятии внутренних переменных, содержится в [280]. Представлены работы, в которых внутренние переменные применены для анализа поведения широкого класса материалов (металлы и сплавы, композиты, порошковые материалы,

геоматериалы, биоматериалы) и исследования широкого круга процессов (пластичность, ползучесть, повреждаемость, изготовление функциональных материалов). В значительной части цитируемых работ внутренние переменные вводятся на основе термодинамического формализма без обсуждения явной роли внутренних переменных как параметров, описывающих эволюционирующую микроструктуру; при этом рассмотрение ведется, как правило, на одном масштабном уровне.

Рассмотрим формулировку конститутивной модели с внутренними переменными [127]. Обозначим набор последних как $\mathbf{J}_\beta, \beta = \overline{1, B}$ (в общем случае – произвольной валентности, вопрос о выборе типа и физического смысла внутренних переменных решается на основе физического анализа рассматриваемых процессов).

Часть внутренних переменных – непосредственно входящих в ОС (уравнение связи отклика с воздействием) данного масштабного уровня, – будем обозначать $\mathbf{J}_\beta^e, \beta = \overline{1, B^e}$ и для ясности называть внутренними «явными» (explicit) переменными; к переменным этого типа относятся, например, характеристики поверхности текучести в теориях пластического течения [4]. Другую часть внутренних переменных – необходимых для определения изменения явных внутренних переменных, – будем обозначать как $\mathbf{J}_\beta^i, \beta = \overline{1, B^i}$, и называть внутренними «скрытыми (неявными)» (implicit) переменными; к таким переменным можно отнести, например, плотность дислокаций [4]. Полная совокупность внутренних переменных, таким образом, определяется как $\{\mathbf{J}_\beta\} = \{\mathbf{J}_\gamma^e, \mathbf{J}_\delta^i\}$, $\beta = \overline{1, B}$, $\gamma = \overline{1, B^e}$, $\delta = \overline{1, B^i}$, $B = B^e + B^i$.

Совокупность уравнений конститутивной модели с введенными внутренними переменными выглядит следующим образом:

$$\begin{cases} (\boldsymbol{\Sigma})^r = \mathcal{F}_r(\mathbf{P}_\alpha, \mathbf{J}_\gamma^e), \\ (\mathbf{J}_\gamma^e)^r = \mathbf{C}_{r\gamma}(\mathbf{P}_\alpha, \mathbf{J}_\delta^i), \quad \gamma = \overline{1, B^e}, \\ (\mathbf{J}_\delta^i)^r = \mathbf{R}_{r\delta}(\mathbf{P}_\alpha, \mathbf{J}_\beta^i), \quad \delta = \overline{1, B^i}. \end{cases} \quad (1.2.1)$$

В системе (1.2.1) Σ – напряжения, $(\)^r$ – независимая от выбора системы отсчета (коротационная или конвективная) производная тензорной величины (вопрос формулировки геометрически нелинейных ОС подробнее рассматривается в п.3.1), $\mathbf{P}_\alpha, \alpha = \overline{1, A}$ – совокупность параметров воздействия термомеханической (температура, градиент скорости перемещений) и нетермомеханической (например, радиация, химические воздействия) природы, $\mathcal{F}_r(\), \mathbf{R}_{r\delta}(\), \mathbf{C}_{r\gamma}(\)$ – тензорзначные функции (необходимого ранга), также обладающие свойством независимости от выбора системы отсчета. Соотношения (1.2.1)₁ будем называть уравнениями состояния (или ОС), (1.2.1)₂ – замыкающие уравнения для определения изменения явных внутренних переменных, (1.2.1)₃ – эволюционные соотношения для изменения неявных внутренних переменных. Отметим, что вместо системы (1.2.1) в скоростной форме могут использоваться уравнения в интегральной форме, выбор скоростной формулировки обусловлен большей ясностью учета геометрической нелинейности в случае действия множества механизмов деформирования (гл.3).

Структура соотношений типа (1.2.1) удовлетворяет принципу детерминизма и принципу независимости ОС [124] от выбора системы отсчета Нолла, при корректной формулировке правых частей будет выполняться и принцип локальности [124].

Здесь не рассматривается конкретный вид и «наполнение» внутренних переменных (для предлагаемых моделей это сделано в гл.2–6), главное – чтобы они действительно отражали структуру материала и механизмы деформирования на мезо- и микроуровнях. В то же время следует отметить, что в широком классе обобщенных континуумов [43, 69, 75, 176, 177, 179, 180, 206, 229, 242, 248 и др.] в качестве явных внутренних переменных макроуровня могут фигурировать вторые градиенты вектора места (или перемещений), тензоры ротации (или спины) материальных элементов мезо- и/или микроуровня, пластическая составляющая тензора деформации (или тензора деформации скорости). Одной из основных проблем применения теорий, вводящих меры напряжений и моментных напряжений, является необходимость задания граничных условий в терминах

напряжений более высоких порядков, физический смысл которых и установление конкретных значений соответствующих параметров нагрузки на границе не отличаются ясностью, что, в свою очередь, затрудняет использование данных теорий для решения краевых задач МДТТ. И для указанных моделей, и для теорий, не включающих в рассмотрение дополнительных мер напряжений и моментных напряжений, необходимым является введение масштабного фактора, определение и обоснование которого представляет одну из сложностей градиентных теорий. Различные подходы и физическое обоснование «назначения» масштабного фактора приведены в цитируемой выше литературе, однако однозначного физически обоснованного решения вопроса к настоящему моменту не предложено. В связи с этим в настоящей работе рассмотрение ограничено ФТП в рамках классических континуумов на каждом масштабном уровне, хотя стоит отметить, что в последние годы появилось много работ, рассматривающих модель мезоуровня как обобщенный континуум (например, набирают популярность модели [318, 319]).

При применении многоуровневого физического подхода, конечно, возникает вопрос, восходящий к известной проблеме замыкания эволюционных и определяющих уравнений: при формулировке физических уравнений для ПО некоторого уровня возникает необходимость введения параметров меньшего масштабного уровня и эволюционных уравнений для них, и так далее – вниз по «лестнице масштабов» [4, 145]. Действительно, как отмечено выше, и при многоуровневом моделировании полностью избежать включения в модель феноменологических соотношений, конечно, нельзя, однако они формулируются для самого низкого масштабного уровня модели, для которого возможна конкретизация физических механизмов деформирования и детальное их описание с использованием известных положений ФТТ (это представляется существенно более простой задачей по сравнению с задачей установления макрофеноменологических соотношений, одновременно учитывающих состояние многомасштабной внутренней структуры и описывающих многообразие всех механизмов неупругого деформирования) [4, 145].

Конститутивные модели вида (1.2.1) являются более удобными для анализа и

приложений, чем ОС в операторной (интегральной) форме. В частности, для соотношений (1.2.1) в полной мере может применяться аппарат тензорного исчисления и анализа.

Следует остановиться на еще одном преимуществе рассматриваемого подхода по сравнению с традиционно используемыми в МДТТ, которое проявляется при решении конкретных геометрически нелинейных проблем. Как правило, для решения задач с большими градиентами перемещений применяются численные методы, чаще всего – метод конечных элементов (МКЭ). Поскольку твердые деформируемые тела в большинстве случаев представляют собой материалы с памятью, для решения приходится принимать ту или иную разновидность лагранжева способа описания движения континуума, когда узлы расчетной сетки связаны с материальными точками. В задачах с большими деформациями это приводит к существенному искажению начальной формы элементов, постепенно ухудшающейся обусловленности систем алгебраических уравнений (вплоть до их вырождения), к решению которых сводится исходная проблема. В связи с этим при решении практически важных задач используются периодические перестроения сетки и различные процедуры пересчета параметров состояния среды со «старых» узлов на «новые». Относительно просто можно переопределить параметры, характеризующие текущее (в момент перестройки сетки) состояние материала – компоненты тензоров напряжений, деформаций и т.д. (хотя и эта задача не относится к разряду тривиальных, поскольку указанные параметры должны удовлетворять всем соотношениям краевой задачи). Однако неизмеримо более сложной представляется проблема переопределения историй воздействий для «новых» узлов; автору не известны в доступной литературе примеры такого переопределения. Внутренние переменные, как отмечено выше, являются текущими параметрами, «здесь» и «сейчас» характеризующими микроструктуру материала, поэтому задача их переопределения в «новых» узлах по значениям в «старых» имеет тот же порядок сложности, что и переопределение напряжений, деформаций и т.д., т.е. является принципиально разрешимой. Однако при этом внутренние переменные являются носителями памяти о предыстории всех учитываемых в задаче воздействий. Таким образом, переопределяя

внутренние переменные тем самым для каждого «нового» узла сетки будет учтена и предыстория воздействий на него. При использовании многоуровневых моделей (п.1.3) открывается возможность при каждом пересчете сетки переопределять состав элементов мезоуровня, входящих в представительный макрообъем (поведение которого, вообще говоря, и описывают параметры состояния узловой точки).

Таким образом, в настоящей работе принимается структура конститутивной модели (1.2.1) (в главах 2, 3, 6 приводятся конкретизированные соотношения). По аналогичной схеме строятся и все известные модели ФТП, обзор которых представлен в п.1.3.

1.3. О многоуровневых моделях, основанных на физических теориях неупругости и введении внутренних переменных

К настоящему моменту предложено множество многоуровневых моделей МДТТ, построенных в рамках физического подхода с введением внутренних переменных (п.1.2). Рассмотрение ограничим моделями, основанными на физических теориях пластичности (ФТП), в основе формулировок которых лежит рассмотрение в явной форме механизмов деформирования на мезо- и микромасштабах (т.е. масштабных уровнях, меньших уровня ПО на макроуровне), носителями которых являются дефекты кристаллического строения. Более ранние версии приведенного ниже обзора содержатся в [141, 142, 144], частично в качестве базы использовался материал публикаций [130–132]. Приводится краткая версия обзора, полная содержится в проходящей редакционную подготовку монографии (П.В.Трусов, А.И. Швейкин. Многоуровневые модели моно- и поликристаллических материалов: теория, алгоритмы, примеры применения. – Новосибирск: Изд-во СО РАН. – ориентировочный объем 680 с.).

По существу все известные в ФТП модели материалов являются многоуровневыми (число рассматриваемых масштабных уровней определяется исследователем, исходя из анализируемого конкретного процесса, требуемой степени детализации, известных или предполагаемых механизмов деформирования). К основным составляющим таких моделей относятся

подмодели элементов нижнего в иерархии масштабных уровней, используемых в модели, и принимаемые в ней гипотезы о связях одноподобных переменных различных уровней (иногда их называют гипотезами агрегирования); при этом подмодели часто оказываются тесно связанными, что вызывает определенные сложности с классификацией подмоделей. В большинстве ФТП простейшими объектами являются отдельные кристаллиты, с описания поведения которых начинается построение практически всех вариантов ФТП (этим обусловлено и англоязычное название моделей этого класса – «crystal plasticity»). В настоящем разделе сначала более подробно рассматриваются основные гипотезы, принимаемые в ФТП на мезомасштабном уровне (по принятой в работе вслед за приведенной в [145] классификации это – уровень описания однородно деформируемого кристаллита), затем приведен краткий аналитический обзор многоуровневых моделей материалов, построенных на их основе с использованием разных гипотез агрегирования.

Об описании деформирования кристаллитов

Основным механизмом неупругого деформирования монокристаллов в ФТП считается движение краевых дислокаций, что подтверждено огромным количеством экспериментов. Включение в рассмотрение только краевых дислокаций обусловлено отчасти сложившейся в ФТП традицией; кроме того, винтовые дислокации имеют бóльшую энергию активации и меньшую плотность по сравнению с краевыми дислокациями. Стоит отметить, что в последнее время предлагаются работы, в которых явно учитываются и другие типы дефектов (например, [230]), однако внутризеренное скольжение дислокаций (ВДС) остается лидирующим механизмом. В главе 6 рассматривается модель для описания сверхпластического деформирования, учитывающая и другие механизмы, активные при повышенной температуре, в частности, зернограничное скольжение.

Условием активации k -й системы скольжения (СС) является достижение касательного напряжения в ней некоторого критического напряжения $\tau_c^{(k)}$ – закон Шмида [394, 416]:

$$\mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)} : \boldsymbol{\sigma} \equiv \mathbf{m}^{(k)} : \boldsymbol{\sigma} = \tau_c^{(k)}, \quad \sum_k \quad , \quad (1.3.1)$$

где $\mathbf{n}^{(k)}, \mathbf{b}^{(k)}$ – единичные векторы нормали к плоскости скольжения и направления скольжения, $\boldsymbol{\sigma}$ – тензор напряжений Коши мезоуровня; $\mathbf{m}^{(k)} = \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)}$ (\sum_k) – ориентационный тензор k -ой системы скольжения.

При наличии K активных СС ВДС, для которых удовлетворяется закон Шмида (1.3.1), девиатор пластической составляющей тензора деформации скорости \mathbf{d}^p определяется соотношением:

$$\mathbf{d}^p = \sum_{k=1}^K \mathbf{m}_{(S)}^{(k)} \dot{\gamma}^{(k)}, \quad (1.3.2)$$

где $\dot{\gamma}^{(k)}$ – скорость сдвига в k -ой СС, $\mathbf{m}_{(S)}^{(k)}$ – симметризованная часть $\mathbf{m}^{(k)}$. Заметим, что пластическая деформация – изохорическая, $\mathbf{d}^p = \mathbf{d}'^p$, поскольку шаровая часть тензора $\mathbf{m}^{(k)}$ – нулевой тензор.

Введением скоростей сдвигов осуществляется континуализация на мезоуровне – от рассмотрения движения отдельных дислокаций осуществляется переход к описанию в терминах осредненных характеристик – сдвигов (скоростей сдвигов), полагаемых однородными для кристаллита. Обычно принимается справедливое уравнение Орована [364], которое в случае одиночного сдвига имеет вид:

$$\dot{\gamma} = b\rho v, \quad (1.3.3)$$

где b – модуль вектора Бюргерса, ρ – плотность подвижных дислокаций, v – средняя скорость движения дислокаций. Соотношение, устанавливающее связь между \mathbf{d}^p и характеристиками дислокаций в общем случае скольжения и переползания краевых и движения винтовых дислокаций, можно найти в [89]. Как отмечено выше, в большинстве работ по ФТП на мезоуровне используется гипотеза (1.3.3), хотя при этом под элементом мезоуровня может пониматься только часть зерна (субзерно или фрагмент).

Критерий Шмида (1.3.1) используется в ФТП как критерий текучести в каждый момент деформирования. Очевидно, что текущее значение критического

напряжения сдвига по СС $\tau_c^{(k)}$, являющегося важной внутренней переменной модели, зависит от истории деформирования; ниже рассмотрены работы, в которых предлагаются различные кинетические уравнения для него.

Условие Шмида (1.3.1) определяет поверхность (многогранник) текучести кристаллита $f(\mathbf{s})$, задаваемую соотношением:

$$f(\mathbf{s}) = \mathbf{m}_{(s)}^{(k)} : \mathbf{s} - \tau_c^{(k)} = 0, \quad k = \overline{1, 2K}, \quad (1.3.4)$$

где \mathbf{s} – девиатор тензора напряжений Коши, K – полное число СС рассматриваемого монокристалла (далее под K будет пониматься именно число систем скольжения, равное удвоенному числу кристаллографических СС). Использование удвоенного числа СС позволяет описывать эффект Баушингера. Детальный анализ построения поверхности текучести ГЦК – монокристаллов в пространстве напряжений Коши представлен в [304], для ГПУ – кристаллов – в [422].

При неизменном положении локальной подвижной системы координат (ПСК), связанной с кристаллитом (подробно вопрос определения этой системы координат обсуждается в главе 3), соотношения (1.3.4) представляют собой совокупность K линейных уравнений для неизвестных \mathbf{s} , т.е. определяют K гиперплоскостей в пространстве напряжений, образующих K -гранник (многогранник) текучести.

Сингулярная поверхность текучести (1.3.4) (с «острыми» ребрами и вершинами) обуславливает трудности при построении соотношений теории пластичности по аналогии с теорией пластического течения. Поэтому были предприняты попытки замены критерия текучести (1.3.4) с сингулярностями гладкими условиями. Например, в работах [190, 256, 257] предлагается аналог критерия Шмида в виде:

$$f(\mathbf{s}) = \left(\sum_k |\mathbf{m}_{(s)}^{(k)} : \mathbf{s}|^q \right)^{1/q} - \tau_c = 0, \quad 2 \leq q \leq \infty. \quad (1.3.5)$$

Условие (1.3.5) может быть легко модифицировано для случая различных критических напряжений на плоскостях скольжения:

$$f(\mathbf{s}) = \left(\sum_k |\mathbf{m}_{(s)}^{(k)} : \mathbf{s} / \tau_c^{(k)}|^q \right)^{1/q} - 1 = 0. \quad \text{В [258] условие текучести (1.3.5) и следующий из}$$

него закон течения применен для анализа формирования текстуры ГЦК – поликристаллов. Из сопоставления экспериментальных и теоретических результатов отмечается, что параметр q может быть связан с энергией дефекта упаковки монотонной возрастающей функцией.

В работе [309] данное условие модифицировано для включения в рассмотрение (наряду со скольжением дислокаций) двойникования. Модифицированная упругопластическая модель применена для анализа деформирования материалов с низкой энергией дефекта упаковки (легированная сталь, латунь), склонных к двойникованию; результаты расчета находятся в удовлетворительном соответствии с экспериментальными данными.

В ряде работ [225, 233, 368, 455 и др.] на основе экспериментальных данных, полученных на монокристаллах некоторых металлов с ОЦК–решеткой (Fe_α, Mo, Nb, Ta), интерметаллидов (например, Ni₃Al, Ni₃Ga, Ti₃Al, Nb–Mo, Ta–Re), оксидов и полупроводников, и теоретических исследований (в том числе – методами молекулярной динамики) отмечается, что в определении критерия текучести и разрешающих напряжений в СС необходимо учитывать не только касательные напряжения, но и другие компоненты тензора напряжений (в базисе $\mathbf{b}^{(k)}$, $\mathbf{n}^{(k)}$, $\mathbf{l}^{(k)} = \mathbf{b}^{(k)} \times \mathbf{n}^{(k)}$ k -й СС). С физической точки зрения влияние всех компонент тензора напряжений («нешмидовский» эффект) объясняется изменением конфигурации атомов в окрестности ядра дислокаций, обуславливающим изменение критических напряжений сдвига. В этом случае необходимо переопределить ориентационный тензор $\mathbf{m}_{(S)}^{(k)}$ в критерии текучести (1.3.4), заменив его на тензор $\mathbf{m}'_{(S)}{}^{(k)} = \mathbf{m}_{(S)}^{(k)} + \Delta\mathbf{m}^{(k)}$. Компоненты тензора $\Delta\mathbf{m}^{(k)}$ в базисе $\mathbf{b}^{(k)}$, $\mathbf{n}^{(k)}$, $\mathbf{l}^{(k)}$ имеют следующий вид:

$$[\Delta\mathbf{m}^{(k)}] = \begin{bmatrix} \Delta m_{11}^{(k)} & 0 & \Delta m_{13}^{(k)} \\ 0 & \Delta m_{22}^{(k)} & \Delta m_{23}^{(k)} \\ \Delta m_{13}^{(k)} & \Delta m_{23}^{(k)} & \Delta m_{33}^{(k)} \end{bmatrix}.$$

Безразмерные компоненты $\Delta m_{ij}^{(k)}$ тензора $\Delta\mathbf{m}^{(k)}$ определяются экспериментально, по модулю имеют порядок десятых (при низких температурах), сотых и менее, могут быть как положительными, так и отрицательными. Условие

текучности по СС в этом случае называется «нешмидовским» (non-Schmid's) законом и математически записывается в виде, подобном (1.3.4):

$$f(\boldsymbol{\sigma}) = \mathbf{m}_{(S)}^{(k)} : \boldsymbol{\sigma} - \tau_c^{(k)} = 0, \quad k = \overline{1, 2K},$$

где $\boldsymbol{\sigma}$ – тензор напряжений Коши.

Применение нешмидовского закона в ФТП в рамках различных вариантов двухуровневых моделей обнаруживает значительные отличия (от результатов, полученных с применением аналогичных моделей с использованием закона Шмида) в значениях предела текучности моно- и поликристаллов, упрочнения, различии напряжений течения на растяжение и сжатие, более резкой и интенсивной локализации сдвигов, формировании более размытой текстуры. Отметим, что, несмотря на наличие описанных усовершенствований, в большинстве работ используется закон (1.3.4) для характеристики активности сдвига по СС ВДС.

Определение функции текучности и принцип градиентальности в сочетании с тем или иным законом упрочнения, определяющим изменения критических напряжений в СС при деформировании (применяемые в работе соотношения приведены в п.2.2), образуют базис, достаточный для описания поведения монокристаллов. В связи со сложностью реализации пластических моделей для описания ВДС с критерием (1.3.4) в последнее время большинство исследователей используют вязкопластические модели. Рассмотрим далее многоуровневые модели, построенные на базе упомянутых гипотез мезоуровня (модели будут классифицированы в зависимости от типа соотношений мезоуровня для связи скоростей сдвигов и напряжений, которые будут охарактеризованы там же).

О переходе к описанию деформирования поликристаллов

Поликристаллы состоят из множества различно ориентированных кристаллических объектов на мезоуровне (с относительно правильным строением кристаллической решетки – зерен, субзерен, фрагментов) и границ между ними. Границы представляют собой специфические области дефектной структуры с характерной толщиной в несколько межатомных расстояний и плотностью

дислокаций в 1.2–1.4 раз выше, чем в зернах [115], что обуславливает и повышенную удельную внутреннюю энергию границ по сравнению с зернами. В связи с этим при определенных условиях границы зерен могут выступать и как «носитель» механизма неупругого деформирования – зернограничного скольжения (гл.6); кроме того, они оказывают непосредственное влияние на ВДС, будучи источником решеточных дислокаций и являясь барьером для движения решеточных дислокаций при несоответствии ориентировок соседних зерен (в результате в границе создаются специфические дефекты – дислокации ориентационного несоответствия, поля от которых препятствуют ВДС в зерне; данный вопрос подробнее рассматривается в п.2.2, в п.6.2 – при условии реализации зернограничного скольжения), за счет которого также активизируются ротационные моды деформирования, в границах реализуются и аккомодационные механизмы (например, зернограничная диффузия, п.6.2).

Остановимся на некоторых гипотезах, используемых в большинстве моделей при построении моделей для описания поведения поликристаллов, основанных на подмоделях мезоуровня.

Самой распространенной гипотезой в ФТП является гипотеза Фойгта (в некоторых работах ее называют гипотезой Тейлора): полные деформации (или скорости деформации) зерен равны средней (для ПО макроуровня) деформации (скорости деформации). Альтернативная гипотеза Рейса (называемая в некоторых работах гипотезой Закса) предполагает однородность напряжений по поликристаллическому агрегату.

С использованием гипотезы Фойгта получается верхняя оценка напряжений (интенсивность напряжений получается наибольшей), гипотезы Рейса – нижняя оценка. Понятно, что ни одна из этих гипотез полностью не отражает реального взаимодействия кристаллитов в поликристалле; например, в статье [372] на основе тщательно проведенных экспериментальных и теоретических исследований показана неоднородность деформаций и ротаций решетки даже в пределах отдельных зерен. В связи с этим значительное число работ проведено в направлении поиска новых способов агрегирования подмоделей кристаллитов (монокристаллитов) в модель поликристалла.

Согласно одному из таких способов параметры процесса предлагается усреднять по результатам расчетов с применением каждой из указанных гипотез по отдельности. Например, в работах [175, 334, 335] используется указанное линейное взвешенное осреднение всех параметров процесса (напряжений, деформаций скорости, скорости поворота решетки). Также предлагается и более сложная нелинейная модель осреднения, основанная на минимизации функции $r = (1-w)r_d + wr_c$, где r_d и r_c – соответственно отклонения нормы локальной деформации скорости от средней и локальных напряжений (в зернах) от средних по поликристаллическому агрегату, w – весовой коэффициент.

Е.Кренером было предложено линейное соотношение, связывающее локальные отклонения девиаторов напряжений $\mathbf{s}^{(n)}$ и пластических деформаций $\mathbf{e}^{(n)p}$ от осредненных $\langle \mathbf{s} \rangle$, $\langle \mathbf{e}^p \rangle$: $\langle \mathbf{s} \rangle - \mathbf{s}^{(n)} = m_{(n)} (\mathbf{e}^{(n)p} - \langle \mathbf{e}^p \rangle)$, \sum_n , где $m_{(n)}$ – константа материала для n -го зерна (информация из [133]).

Детальное изложение подхода, основанного на так называемом принципе многоуровневой виртуальной мощности, устанавливающим равенство виртуальной мощности макронапряжений и микронапряжений на соответствующих виртуальных скоростях деформации, и позволяющего связать переменные двух уровней в широком классе конститутивных теорий, содержится в [214]. Дальнейшее развитие (включением в рассмотрение объемных сил и сил инерции на микроуровне) данного подхода рассматривается в [213, 235].

Интересный подход к гомогенизации параметров и соотношений макроуровня по соответствующим данным микроуровня предложен в [178]. Согласно этому подходу конститутивные соотношения макроуровня представляются разложением в ряд на основе ОС микроуровня и моментов произвольного порядка переменных микроуровня.

В ФТП используются и более сложные подходы к объединению кристаллитов в поликристаллический агрегат. Весьма популярным являются «самосогласованные модели» (или «модели среднего поля»), базирующиеся на решении краевой задачи об одиночном включении (зерне) в матрице, имеющей осредненные («эффективные») характеристики поликристалла. К сожалению,

аналитические решения подобной задачи возможны только для включений канонической формы. Известные самосогласованные модели требуют весьма существенных вычислительных ресурсов, в связи с чем большая часть исследователей предпочитает более простые подходы. Обзоры современных самосогласованных моделей содержатся, например, в статьях [273, 321, 341].

Следует отметить, что самосогласованные модели требуют весьма значительных вычислительных ресурсов. Кроме того, поскольку окружение зерна представляется в самосогласованных моделях некоторым эффективным континуумом, как правило – изотропным, в моделях этого класса отсутствует возможность рассмотрения взаимодействия дислокаций СС соседствующих зерен, порождающего дополнительное упрочнение в СС, равно как возникновение поворотов кристаллических решеток [115]. Автору неизвестны также попытки применения самосогласованных моделей для учета одного из важных (особенно – для мелкозернистых (начиная от среднего размера зерна 10 мкм и менее) материалов) механизма деформирования зернограничным скольжением (гл.6), которые можно было бы назвать успешными. Как представляется, указанные недостатки принципиально непреодолимы в данном классе моделей.

Статистические и самосогласованные модели ориентированы на моделирование поведения материала, рассматриваемого как некая гомогенная на макроуровне среда. Существует другой класс моделей, в которых ОС той или иной физической теории используются непосредственно в постановке краевой задачи для поликристаллического образца. Значительная часть исследователей применяют для реализации таких моделей МКЭ. Зерно аппроксимируется одним или несколькими (до сотен) конечными элементами, в которых конститутивная модель материала строится на основе выбранной физической теории. Модели этого типа в дальнейшем будут называться «прямыми» [142]. По сути, эти модели являются одноуровневыми, имеет место геометрическое описание кристаллитов конечными элементами, которые отражают реальную конфигурацию зеренной структуры. Понятно, что в этом случае вопроса о «согласовании» полей перемещений и вектора напряжений не возникает, непрерывность полей (обычно – в слабой форме) обеспечивается автоматически. Однако модели данного типа

являются еще более ресурсоемкими, чем самосогласованные. Следует отметить, что в последние годы для определения локальных полей параметров мезоуровня (напряжений, скоростей деформаций и т.д.) предлагается использовать подход, основанный на быстром преобразовании Фурье (например, [282, 374], что позволяет сократить время расчетов на ЭВМ при удовлетворительной точности полученных результатов.

В настоящее время прямые модели применяются для анализа НДС при изготовлении и эксплуатации деталей микромеханизмов (характерные масштабы – не более нескольких миллиметров). В большинстве известных автору работ модели данного типа используются для исследования поведения образцов различных материалов (на уровне представительных макрообъемов), и в этом случае они несомненно относятся к конститутивным моделям. При этом прямые модели позволяют рассматривать представительный макрообъем (макрообразец) как «конструкцию» со сложной структурой, неоднородным поведением на мезоуровне. Понятно, что отклик такого образца будет существенно зависеть от масштабного фактора, числа структурных элементов более низких масштабных (мезо- и микро-) уровней, входящих в ПО. Это, в свою очередь, позволяет установить действительный масштаб представительного макрообъема как минимального объема, при превышении которого осредненный отклик образца на одни и те же воздействия с предписанной точностью остается неизменным.

Далее представлен краткий обзор известных многоуровневых моделей указанных классов (статистических, самосогласованных, прямых), упорядоченных в соответствии с типом используемых на мезоуровне соотношений (выделяют жесткопластические, упругопластические, вязкопластические и упруговязкопластические модели).

Жесткопластические модели

Одной из первых попыток построения модели поликристалла на основе рассмотрения совокупности монокристаллов была модель Закса [342, 394]. Зерна полагались ориентированными хаотически по равномерному закону распределения, взаимодействием между ними пренебрегалось. Модель Закса в

исходной формулировке была предназначена для определения предела текучести при одноосном растяжении/сжатии поликристаллического образца по известному значению критического напряжения сдвига τ_c для СС зерен [130]. Расчеты по модели Закса дают значение макроскопического напряжения текучести σ_s , равное $2,2\tau_c$. Хотя полученный результат существенно (примерно на 30%) отличается от экспериментально определенного предела текучести, его все же следует признать удовлетворительным для своего времени.

В модели Тейлора [416] также принималось равномерное распределение ориентаций зерен, жесткопластические соотношения для описания ВДС в зернах, изотропное упрочнение (одинаковое для всех СС), пренебрежение влиянием границ зерен. Для разрешения проблемы неоднозначности определения сдвигов ВДС по заданному девиатору деформаций (обзоры существующих методов решения этой проблемы содержатся, например, в [207, 340]) предложен эвристический принцип – принцип минимума сдвига (строго говоря, минимизируется сумма модулей скоростей сдвигов; при обобщении на случай анизотропного упрочнения минимизируется мощность). Тейлор использовал модель для построения кривой одноосного деформирования алюминия, получив хорошее соответствие результатов с экспериментальными данными.

В работах Бишопа и Хилла [211, 212] предложена жесткопластическая модель, имеющая близкие концептуальные положения к модели Тейлора, но более проработанное математическое оснащение; используемый для разрешения проблемы неоднозначности определения сдвигов принцип максимума работы является двойственным [55] принципу минимума сдвига. В последнее десятилетия модели, концептуально близкие к модели Тейлора, называют моделями «типа Тейлора–Бишопа–Хилла» (ТБХ).

Модели типа ТБХ до сих пор широко применяются; в качестве примеров можно привести работы, нацеленные на усовершенствование соотношений мезоуровня и их применение для практических задач: [255] – предпринимается попытка ввода дополнительных кинематических ограничений для ротационной моды, например, вводится гипотеза о запрете поворотов вдоль оси растяжения

образца, [436] – предлагается закон упрочнения для учета взаимодействия дислокаций разных СС, в том числе – аннигиляции дислокаций при изменении направления нагружения, [273] – обзор работ по применению моделей ТБХ, [236] – применение для анализа резания монокристаллической заготовки, [277, 278] – проводится аналитическое и численное исследование стесненной осадки ГЦК-монокристаллов при специальных ориентациях. В [437, 438] рассматривается методика построения поверхности текучести текстурированного материала на базе модели ТБХ.

В работе [440] предлагается для более точного описания текстурообразования за счет физически обоснованного выбора дополнительных (релаксационных) мод деформации. В качестве возможного варианта авторы предлагают и весьма детально описывают «модель слоя» (или «слоистая модель») («*lamel model*»), специфицированную для определенных процессов деформирования (релаксационная мода жестко «привязывается» к конкретному процессу, виду деформированного состояния). Отметим, что указанный подход близок к предлагаемому в некоторых работах, например, в [210, 275] способу моделирования двухфазных материалов с использованием условия контакта по границам фаз.

Исследователями предложены и «многозеренные» статистические модели, для которых гипотеза Фойгта должна выполняться в целом для элемента (кластера), но скорости деформаций отличаются от зерна к зерну (заметим, что внутриэлементные границы неравноправны границам кластера, что не имеет рационального физического объяснения) – модифицированная LAMEL, оперирующая с 2-мя зернами [440], GIA (Grain InterAction) (8 зерен), расширенная модель ALAMEL (advanced LAMEL) [386, 439].

В работе [189] статистическая модель на базе теории ТБХ используется для определения эволюции текстуры и остаточных напряжений (при разгрузке используется упругий закон). В [411] рассматривается применение прямой модели на основе модели мезоуровня ТБХ для анализа процесса деформирования ГЦК-поликристаллов с высокой и низкой энергией дефекта упаковки (ЭДУ). Отметим, что статистическая модель ТБХ часто используется исследователями для

тестирования более сложных моделей. Так, сопоставление результатов, полученных в рамках прямых моделей и модели ТБХ, осуществлено в работах [217, 205, 287, 460].

Одним из основных недостатков жесткопластических моделей ФТП (моделей ТБХ и их модификаций) является неучет упругих деформаций, что не позволяет рассматривать остаточные напряжения, анализ которых важен при исследовании технологических процессов, и невозможность определения давления по кинематическим воздействиям (поскольку рассматривается несжимаемый материал). В связи с указанными обстоятельствами в последние десятилетия интенсивно развиваются упругопластические и упруговязкопластические модели.

Как и в макрофеноменологических теориях пластичности, в таких моделях используется гипотеза аддитивности упругих \mathbf{d}^e и неупругих \mathbf{d}^{in} составляющих тензора деформации скорости \mathbf{d} .

В современных формулировках ОС (упругий закон) задается либо в скоростной форме:

$$\mathbf{k}^{cr} \equiv \dot{\mathbf{k}} + \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\omega} - \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{k} = \mathbf{n} : (\mathbf{d} - \mathbf{d}^{in}), \quad (1.3.6)$$

либо в конечной форме в терминах разгруженной конфигурации (в этом случае используется классическое представление Кренера – Ли градиента деформации $\mathbf{f} = \mathbf{f}^e \cdot \mathbf{f}^p$):

$$\mathbf{k} = \mathbf{n}_0 : \mathbf{c}^e, \quad (1.3.7)$$

где $\mathbf{k} = \overset{\circ}{\rho} / \hat{\rho} \boldsymbol{\sigma}$ – взвешенный тензор напряжений Кирхгоффа, $\mathbf{k}^{cr} = d\mathbf{k} / dt + \mathbf{k} \cdot \bar{\boldsymbol{\omega}} - \bar{\boldsymbol{\omega}} \cdot \mathbf{k}$ – его коротационная производная, $\mathbf{k} = \overset{\circ}{\rho} / \hat{\rho} \mathbf{f}^{e-1} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{f}^{e-T}$ – второй тензор Пиола–Кирхгоффа, $\mathbf{c}^e = 1/2((\mathbf{f}^e)^T \cdot \mathbf{f}^e - \mathbf{I})$ – тензор деформации Коши–Грина, $\boldsymbol{\omega}$ – спин подвижной системы координат, \mathbf{n} , \mathbf{n}_0 – тензор упругих свойств в актуальной (принимается, что его компоненты постоянны в подвижной системе координат) и разгруженной конфигурации. Подробней вопрос формулировки упругих соотношений и их сопоставления рассматривается в гл.2–4.

Основное отличие предлагаемых различными авторами моделей заключается в соотношениях для определения неупругой составляющей тензора деформации скорости \mathbf{d}^{in} (для определения \mathbf{f}^{p}).

Упругопластические модели

В качестве преимущества упругопластических моделей по сравнению с упруговязкопластическими можно отметить большую скорость вычислений, однако для них характерны и существенные недостатки – сложности при описании анизотропным упрочнением, неединственность определения скоростей сдвигов в специальных случаях.

Насколько известно автору, все модели данного класса являются производными модели Линя [59], идея которой заключается в точном обеспечении движения изображающей точки в пространстве напряжений внутри или по поверхности многогранника текучести с точным определением активных в текущий момент СС; существенной составляющей модели Линя является алгоритмическое определение активных СС. В п.2.2 подробно описывается предлагаемая геометрически нелинейная модификация модели Линя, заложенный в нее алгоритм определения активных СС и скоростей сдвигов по ним близок к так называемому А–К–методу (Anand–Kothari method) [184].

Модификация закона упрочнения и определение изменения поверхности текучести для монокристаллов с использованием упругопластической модели рассматривается в работах Венга [444], обобщение модели на случай геометрической нелинейности – в [445], где в законе Гука используется производная Яуманна тензора напряжений Кирхгоффа.

В [467] с применением теории неявных функций получено условие единственности определения скоростей сдвига в монокристалле для произвольного НДС и нелинейного неанізотропного закона упрочнения (рассматривается только случай малых деформаций). В [207] для разрешения проблемы неединственности применяется случайное возмущение критических напряжений в случае попадания изображающей точки в пространстве напряжений в вершину порядка выше пятого.

Применение модели Линя для исследования поведения поликристаллов при сложном нагружении описывается в [419], где использован модифицированный для учета эффекта Баушингера закон упрочнения, моделируются траектории с изломами. Развитие этой модели приводится в работах [311, 417], в которых особое внимание уделяется законам упрочнения для СС и описанию эволюционирующей поверхности текучести.

В статье [356] рассматривается геометрически нелинейная теория термоупругопластичности моно- и поликристаллов, применяется «неогуковский» изотропный упругий закон, получаемый из неравенства Клаузиуса–Планка, используется модель «материального поворота» (различные формулировки соотношений для спина решетки – подвижной системы координат, с ней связанной, – приводятся и анализируются в гл.3, 4).

Альтернативная модели Линя ФТП предлагается в [352]. В качестве упругого ОС применяется анизотропный гиперупругий закон (1.3.7). Описывается процедура определения активных СС и скоростей сдвигов для данной модели, названная М–М (McGinty–McDowell). Отмечается хорошее соответствие результатов при применении А–К и М–М алгоритмов, но последний демонстрирует более высокую вычислительную эффективность.

В работе [197] самосогласованная модель на базе упругопластической модели Линя применена для определения остаточных напряжений второго рода и запасаемой внутренней энергии при растяжении медных образцов, получаемых горячей и холодной листовой прокаткой. Модификация упругопластической самосогласованной модели на случай больших градиентов перемещений представлена в статье [361], в качестве ОС используется (анизотропный) закон Гука в скоростной релаксационной форме; используется коротационная производная тензора напряжений Коши, в качестве спина используется спин Тейлора (см. гл. 4).

В [253] приведены результаты применения упругопластической модели (в статистическом и самосогласованном вариантах) для анализа устойчивости и построения диаграммы предельного формоизменения листовых материалов (на примере однофазной ферритной стали). Результаты исследования интенсивного

пластического деформирования равноканальным угловым прессованием ПО ГЦК–поликристаллического материала (медь) с использованием прямой упругопластической модели представлены в [443].

Вязкопластические модели

Модели этого класса (как и упруговязкопластических) необходимы для исследования процессов деформирования при повышенных температурах и медленных нагружениях, поскольку движение дислокаций (особенно – неконсервативное) является термически активируемым, связанным с диффузионными процессами. Упругими деформациями в моделях данного класса пренебрегается.

В статье [307] подробно описывается вязкопластическая модель, учитывающая влияние температуры, основанная на известной континуальной модели «механического порогового напряжения» (MTS – mechanical threshold stress), предложенной в [247]. Последняя позволяет предсказывать значение напряжения течения в зависимости от скорости деформации, температуры и текущего значения параметра состояния, называемого механическим порогом (изотропная «скалярной» модель). Используется «стандартная вязкопластическая модель Тейлора» (standard rate dependent Taylor model) с «жесткопластическим» мультипликативным разложением градиента деформации. Для скорости сдвига при выполнении критерия Шмида ($\tau^{(k)} \geq \tau_c^{(k)}$) применяется широко используемый [191, 192, 278, 284, 285] степенной закон:

$$\dot{\gamma}^{(k)} = \hat{\gamma}^{(k)}(\tau^{(k)}) = \dot{\gamma}_0 \left| \frac{\tau^{(k)}}{\tau_c^{(k)}} \right|^m \text{sign}(\tau^{(k)}) , \quad (1.3.8)$$

где $\dot{\gamma}_0$ – скорость сдвига на СС при касательном напряжении, равном критическому, $\tau^{(k)}$, $\tau_c^{(k)}$ – касательное и критическое напряжение сдвига на k -й СС, m – параметр скоростной чувствительности. При стремлении $m \rightarrow \infty$ соотношение (1.3.8) приближается к жесткопластическому закону; детально вопрос об эквивалентности вязкопластической и жесткопластической моделей исследован в работах [184, 360]. Отметим, что использование в соотношении (1.3.8) большого

показателя степени m дает возможность использовать безпороговые вязкоупругие модели – без явного применения критерия Шмида ($\tau^{(k)} \geq \tau_c^{(k)}$), вязкое соотношение (1.3.8) с большим значением m обеспечивает приближенное выполнение этого условия [192, 393].

Во многих работах подробно описывается численная процедура; часто для интегрирования по времени используется неявная разностная схема, система нелинейных уравнений решается методом Ньютона–Рафсона [307].

Результаты применения вязкопластических моделей при исследовании различных процессов деформирования в составе многоуровневых моделей различных классов представлены в многочисленных публикациях [182, 208, 292, 328 и др.].

Упруговязкопластические модели

Модели данного класса, лишенные недостатков, характерных для других моделей (неединственность выбора активных СС, сложность численной реализации, неучет упругих деформаций), являются в настоящее время наиболее популярными в ФТП. Определенной сложностью является необходимость интегрирования с достаточно малым шагом, вследствие чего для моделирования технологических процессов в настоящее время применимы только статистические модели, однако представляется, что развитие вычислительной техники со временем устранил указанную проблему.

В упруговязкопластических моделях используются упругие соотношения (1.3.6) или (1.3.7) с определением скоростей сдвигов по СС вязкопластическим законом (например, (1.3.8)). Остановимся лишь на нескольких оригинальных работах.

Одна из первых моделей предложена в работах [420, 421], в которой учитывается возможное разупрочнение при увеличении температуры за счет диффузионных процессов.

Интересный вариант физической модели упруговязкопластичности предложен в работе [310], где монокристалл разделен на «жесткие» (зоны с

повышенной плотностью дислокаций, например, стенки ячеек) и «мягкие» (зоны с пониженной плотностью дислокаций, например, внутренность ячеек) области.

Расширение упруговязкопластической модели путем учета наряду с ВДС двойникования предложена в [294]. Для скоростей сдвигов ВДС и скорости изменения объемной доли двойников использован степенной закон с одинаковым показателем степени; для двойникования предполагается наличие предельной доли двойников, запрещен обратный переход.

В статье [198] детально рассмотрены вопросы построения и применения физических моделей упруговязкопластичности для описания поведения поликристаллов в широком диапазоне скоростей деформации (10^{-3} – 10^2 с⁻¹) при больших деформациях (порядка 100%) и относительно низких гомологических температурах ($T_r < 0.3$). Как и в большинстве работ, использовано мультипликативное разложение градиента места и ОС анизотропной гиперупругости (1.3.7).

В [330] рассматривается прямая упруговязкопластическая модель для описания неизотермического деформирования моно- и поликристаллов с ОЦК-решеткой (α -Fe). В модели для учета переползания и движения перегибов и ступенек используется условие текучести, отличное от закона Шмида (в выражение для разрешающих напряжений на СС входят все компоненты тензора напряжений в кристаллографическом базисе). Для установления нешмидовского закона применяются методы атомарной динамики.

В статье [347] представлены результаты применения прямой упруговязкопластической модели для исследования деформирования двухфазного сплава (титан + алюминий), основной объем которого составляет α – фаза с ГПУ-решеткой, остальная часть имеет слоистую структуру из ($\alpha+\beta$) – фаз (β – фаза – кристаллиты с ОЦК-решеткой). Анализируются физические механизмы деформирования и упрочнения двухфазного сплава, для идентификации физической модели осуществлены три серии численных экспериментов.

Упруговязкопластическая модель для описания деформирования поликристаллического циркония при различных температурах (76 К – 450 К) описана в статье [209]. Принимается, что каждое зерно представляет собой

композит, состоящий из эллипсоидальных включений двойников и такой же формы прослоек матрицы. Каждая из фаз описывается с применением самосогласованной упруговязкопластической модели, для учета влияния температуры используется закон аррениусовского типа, учитывается взаимодействие механизмов ВДС и двойникования. Детально описывается подмодель для анализа генерации и эволюции дислокаций с учетом их взаимодействия, законы упрочнения по различным механизмам сформулированы в терминах плотностей дислокаций и характерных масштабов двойниковой структуры.

Комбинированная упругопластическая – упруговязкопластическая модель, учитывающая температурные воздействия и накопление поврежденности, рассматривается в [412, 413], с помощью которой исследовался суперсплав на никелевой основе (ГЦК–решетка). Скорости (приращения) сдвигов по каждой СС принимаются равными сумме скоростей (приращений) сдвига за счет пластичности и вязкопластичности (ползучести).

Следует отметить две из немногих работ [195, 196], в которых наряду с ВДС учитывается зернограничное скольжение (ЗГС). Для описания ВДС использовано вязкопластическое соотношение (степенной закон), полученное осреднением уравнения Орована. Приведены эволюционные уравнения для плотностей мобильных и иммобильных дислокаций и критических напряжений на СС. В [194] в эволюционных уравнениях предлагается учитывать стохастическое распределение зерен по размерам; для реализации используется метод Монте-Карло в сочетании с дислокационной динамикой и самосогласованной моделью. Полагается, что ЗГС реализуется за счет диффузионных механизмов, обеспечивающих образование плоскости скольжения для групп зерен; для описания ЗГС используется линейно-вязкое соотношение с учетом температуры. Связь параметров мезо- и макроуровня осуществляется с применением самосогласованной модели. Модель реализована в плоской постановке. Для идентификации и верификации модели проведены эксперименты в широком диапазоне изменения скоростей деформаций ($10^{-4} \div 0.2 \text{ с}^{-1}$) и температуры ($370 \div 450^\circ\text{C}$) на образцах из магниевого сплава (2.97% Al, 0.82% Zn, 0.28% Mn,

0.012% Si, 0.0036% Fe, 0.0004% Ni, 0.003% Cu, 0.0008% Be). Показано, что вклад ЗГС в неупругую деформацию составляет до 50%; учет ЗГС позволил существенно улучшить соответствие теоретических и экспериментальных результатов.

В [111] приведено описание прямой упруговязкопластической модели (степенной закон течения, анизотропный закон упрочнения с явным учетом размера зерен). Для рассмотрения квазистатических процессов деформирования предложено использовать уравнения движения, что позволяет применить для решения явную схему интегрирования (результаты исследования вычислительной эффективности решения квазистатических задач в динамической постановке представлены в [112]). Модель применена для анализа возникновения шероховатости при одноосном растяжении пластин из алюминиевого сплава Al1570 и титана. Полученные результаты расчетов свидетельствуют о возникновении шероховатости двух масштабных уровней: уровне зерна (субзерна) и групп зерен.

Результаты исследований по усовершенствованию и применению многоуровневых моделей на базе упруговязкопластических соотношений мезоуровня содержатся во многих статьях, известны работы [183, 239, 296, 301, 308, 320, 345, 423, 462 и др.].

О законах упрочнения ВДС

Важнейшим элементом моделей ФТП всех типов являются эволюционные уравнения для критических напряжений сдвигов ВДС.

Обширный обзор (171 источник) экспериментальных и теоретических работ, посвященных исследованиям физических механизмов упрочнения моно- и поликристаллических металлов и сплавов в период 1934 – 1984 г.г., представлен в работе Д. Кульман-Вильсдорф [315]. Краткий обзор моделей упрочнения, большей частью основанных на экспериментальных исследованиях деформирования монокристаллических образцов, содержится в [317].

Детальный анализ механизмов упрочнения, основанный на рассмотрении движения и взаимодействия дислокаций в ОЦК–кристаллах, представлен в [410]. Основное внимание уделяется следующим процессам: возникновению и

термически активируемому движению парных перегибов; близкодействующим взаимодействиям активированных дислокаций с дислокациями леса и образованию ступенек; размножению дислокаций путем двойного поперечного скольжения и аннигиляции дислокаций.

Детальному описанию законов упрочнения ГЦК–кристаллов посвящена статья [276]. Рассмотрение кинематического и изотропного упрочнения монокристаллов основано на тщательном физическом анализе взаимодействия дислокаций различных СС. Применено гипотеза упругое соотношение, в котором коротационная производная тензора напряжений определяется с использованием тензора спина решетки. Спин решетки полагается равным разности тензора вихря и антисимметричной части тензора скоростей сдвига по СС. Скорости сдвига в СС устанавливаются с помощью вязкопластического закона (произведение степенной и экспоненциальной функций сдвиговых напряжений).

Краткий обзор существующих теорий упрочнения приведен в работе [338]; особое внимание уделяется теориям, основанным на рассмотрении эволюции дислокационных субструктур. Выделена модель [369, 370], в которой зерно представляется совокупностью блоков ячеек; для описания блоков вводятся ориентации потенциально возможных границ и присущие границам плотности дислокаций.

Краткий обзор работ по исследованию влияния границ зерен на деформирование и упрочнение поликристаллов приведен в [354]. Подробно рассматриваются дислокационные взаимодействия по границам кристаллитов. На основе термодинамического подхода предлагается приближенная модель для описания указанных взаимодействий; отдельно анализируются два варианта: реакции с релаксацией (диссипацией) и без нее. Отмечается сложность рассматриваемой проблемы и необходимость привлечения для решения ряда вопросов молекулярной (атомарной) динамики.

Сопоставлению влияния применения различных модификаций законов упрочнения на результаты расчета НДС и эволюции текстуры при одноосном нагружении поликристаллических образцов из алюминиевого сплава, имеющих начальную текстуру, посвящена статья [297]. Для реализации двухуровневой

упруговязкопластической модели использовалась как теория ТБХ, так и прямая модель. Показано существенное влияние соотношения активного и латентного упрочнения на развитие анизотропии образца, поля напряжений и деформаций, неоднородность сдвигов в зернах.

Анализ существующих моделей упрочнения и краткий перечень экспериментальных работ, пригодных для их идентификации, содержится в [260]. Особое внимание уделено применимости двух известных моделей упрочнения (Tabourot–Teodosiu и Méric–Cailletaud) для описания поведения поликристаллов при сложном нагружении. Приведены описание методики и результатов собственных экспериментов на образцах из поликристаллической меди (ГЦК – решетка). Для моделирования ПО при идентификации законов упрочнения использована упруговязкопластическая физическая теория.

Рассмотрению моделей различного уровня для описания зависимости напряжения течения от температуры и скорости деформации тугоплавких металлов с ОЦК – решеткой (вольфрам, молибден, ниобий, тантал) посвящена статья [331]. На микроуровне для этого используется дислокационная модель, основанная на теории парных перегибов (A.Seeger, 1981). Указанные модели использованы в соотношениях прямой упруговязкопластической модели.

О некоторых направлениях развития ФТП

Значительный вклад в развитие физических теорий внесен работами В.А.Лихачева и коллег. Обобщающие результаты многолетней работы В.А.Лихачева и В.Г.Малинина по созданию модели, названной авторами структурно–аналитической теорией прочности и пластичности, содержатся в монографии [60], где приведен также весьма обширный список публикаций авторов (приведена краткая характеристика данной монографии из обзора [132]). Анализируя состояние ФТП, авторы отмечают, что основным концептуальным недостатком имеющихся на тот момент теорий являлась попытка описать процессы деформирования, основываясь на рассмотрении поведения самой малой части, которую можно выделить в материале (например, субзерно, фрагмент), неучет самоорганизованной многомасштабности процессов неупругого

деформирования и разрушения. Авторами предложена двухуровневая статистическая модель (микро- и макроуровень).

В ней принято, что все микрообъемы взаимодействуют друг с другом через микронапряжения. При этом вводится дополнительное поле микронапряжений, разделенное на две составляющие – ориентированные и неориентированные микронапряжения. Поля ориентированных микронапряжений порождаются неоднородными неупругими макродеформациями и не исчезают при снятии (в макросмысле) внешней нагрузки. Поля неориентированных микронапряжений обуславливаются многими причинами, к числу которых относятся: несовместности температурных деформаций микрообъемов, неоднородности упругих характеристик на микроуровне, неоднородностей магнитострикционных и электрострикционных микродеформаций, неоднородность неупругих микродеформаций. В качестве процедуры осреднения принимается ориентационное и статистическое осреднение (по некоторым параметрам).

Детально анализируются большинство из известных механизмов упругого и неупругого деформирования (температурные, магнитострикционные, электрострикционные, диффузионные, вязкие (деформации ползучести), сдвиговые (за счет скольжения дислокаций), деформации двойникованием, деформации за счет мартенситных превращений). Для каждого из указанных механизмов записываются ОС микроуровня, связывающие скорости микродеформаций с эффективными микронапряжениями и их скоростями. Для тензора скорости микродеформаций принимается гипотеза об аддитивности скоростей микродеформаций по всем реализующимся механизмам.

Поскольку основными механизмами неупругого деформирования моно- и поликристаллических металлов являются кристаллографический сдвиг и двойникование, рассмотрение этих механизмов выделено в отдельную главу. Приведены соотношения конститутивной модели для описания пластического деформирования, деформаций ползучести (с разделением их на деформации ползучести, обусловленные возвратом, и деформации термоактивируемой ползучести). Приведены результаты численных расчетов для различных пропорциональных и сложных нагружений, отмечается их хорошее качественное

соответствие экспериментальным данным. Значительная часть монографии посвящена анализу прочности и разрушения поликристаллов, а также рассмотрению деформирования материалов с мартенситным механизмом неупругого деформирования (в частности – материалов, обладающих эффектом памяти формы).

Сведения о разработанных в коллективе, к которому принадлежат авторы процитированной монографии (С.П.Беляев, А.Е.Волков, В.А.Ермолаев, З.П.Каменцева, С.Л.Кузьмин, В.А.Лихачев, В.Ф.Мозгунов, А.И.Разов, Р.Ю.Хайров и др.), различных моделях, в том числе – многоуровневых, для описания твердотельных фазовых переходов в материалах с памятью формы приведены в [8], где содержится чрезвычайно обширная информация об экспериментальных и теоретических исследованиях по указанному вопросу.

В последние 10-15 лет наблюдается тенденция по дальнейшему углублению физических теорий, включение в рассмотрение следующего масштабного уровня – микроскопического, на котором анализируется движение и взаимодействие дислокационных ансамблей. Например, в работе [337] приведено краткое описание эволюции микроструктуры при деформировании ГЦК-монокристаллов (ячейки, блоки ячеек, субзерна, дислокационные стенки, разделяющие ячейки и блоки). Для описания микроструктуры предлагается ввести внутренние переменные, моделирующие блоки ячеек и дислокационные стенки. Скорости сдвигов по СС определяются из закона Орована; скорость движения дислокаций устанавливается кинетическим законом, учитывающим энергию активации дислокаций, температуру, сдвиговые напряжения, плотности мобильных дислокаций и дислокаций леса. Предложены основанные на рассмотрении дислокационных реакций кинетические уравнения для изменения плотностей иммобильных дислокаций в блоках ячеек и в дислокационных стенках.

К настоящему моменту появились многоуровневые модели, в которых делается попытка учета движения и взаимодействия дискретного множества дислокаций методами дислокационной динамики [187, 266, 288] и молекулярной динамики [224].

Повышается интерес к учету в ФТП, наряду со сдвиговыми деформациями, и неконсервативного движения дислокаций («переползания») [259]. Влияние этой моды деформации оказывается существенным при деформировании при малых скоростях деформаций и повышенных температурах материалов, содержащих барьеры дислокационной и недислокационной (например, жесткие включения) природы. Для анализа применяется прямая упруговязкопластическая модель. Особое внимание в цитируемой статье уделено определению движущих сил неконсервативного движения дислокаций; полагается, что данная мода деформации реализуется за счет диффузии вакансий.

В последние годы для модификации различных физических теорий все чаще исследователями применяются модели обобщенных континуумов (градиентные теории – в особенности).

Во многих работах используется концепция геометрически необходимых дислокаций (ГНД), восходящая к работам [193, 303, 363]. Согласно этой концепции, наряду со статистически накопленными дислокациями (СНД) [193], являющимися следствием однородного пластического деформирования, вблизи областей неоднородности пластических сдвигов (например, в окрестности границ зерен) появляются дислокационные субструктуры типа стенок дислокаций, дислокационных ячеек и т.д., которые должны обеспечить совместность деформации решетки и отвечают за искривления – кручения решетки, которые и называются ГНД. Детальное рассмотрение теории ГНД, определение тензора их плотности через F^p и градиент F^p в отсчетной конфигурации содержится в [226]; некоторые вопросы связи ГНД с упрочнением, характерными масштабами в градиентных теориях анализируются в [314].

Имеются работы, использующие на мезоуровне модели обобщенного континуума, обычно базирующиеся на концепции ГНД [245, 261, 268, 270, 414, 454] (особо значительным в литературе признается вклад М.Е.Gurtin с соавторами). Обширный обзор работ по градиентным моделям ФТП содержится в статье [349].

В последние 15-20 лет отмечается существенное повышение интереса к обобщенным континуумам типа Коссера [229], их обобщению на упругопластические среды и введению в ФТП [250, 251, 299, 336].

Как отмечено выше, приведенный обзор является достаточно кратким. Напомним, что для лучшего структурирования текста диссертации обзор моделей сверхпластичности вынесен отдельно в п.6.1, а обзор подходов к формулировке геометрически нелинейных проблем МДТТ в основном содержится в п.3.1. Ознакомиться в более полном объеме с информацией о содержащихся в литературных источниках описаниях многоуровневых моделей ФТП можно будет в проходящей редакционную подготовку монографии (П.В.Трусов, А.И. Швейкин. Многоуровневые модели моно- и поликристаллических материалов: теория, алгоритмы, примеры применения. – Новосибирск: Изд-во СО РАН. – ориентировочный объем 680 с.), обзорных статьях [141, 142,] (с участием автора), [263, 273, 279, 315, 317, 321, 338, 341, 349, 350, 354, 386, 387 и др.].

По итогам проведенного в данной главе обзора можно сделать следующие выводы:

1. Для описания технологических процессов ТМО материалов и изделий, при которой могут существенным образом варьироваться воздействия, вызывая разные сценарии изменения структуры материала, необходимы конститутивные модели, построенные в рамках физического подхода, когда в модели материала явно рассматриваются изменения строения материалов и вызывающие их физические механизмы на меньших, чем макроскопический, масштабных уровнях.

2. В рамках данного подхода при учете памяти материала используется переход от интегральных операторов к простым системам дифференциальных уравнений за счет введения внутренних переменных, характеризующих структуру материала и механизмы деформирования.

3. Данное направление развития МДТТ чрезвычайно интенсивно развивается, о чем свидетельствует множество предложенных многоуровневых физических моделей пластичности. Для моделирования технологических процессов в настоящее время наиболее эффективными являются статистические модели.

4. По мнению автора, моделям указанного класса присущ существенный недостаток – слабое обоснование используемых соотношений в случае геометрической нелинейности. В большинстве работ без должного физического обоснования для описания ротации кристаллической решетки используется модель «материального поворота» или «жесткого стеснения» Тейлора (см. п.4.1), в принципе не рассматриваются вопросы разложения движения (на квазитвердое и деформационное), определения соответствующих разложению независимых от выбора системы отсчета производных, позволяющих корректно рассматривать анизотропные материалы.

5. Необходимо развитие аппарата многоуровневых моделей металлов и сплавов с целью применения для более широких диапазонов термомеханических воздействий, в частности, это требуется для исследования перспективных технологических процессов, основанных на использовании деформирования в режиме структурной сверхпластичности. Особую значимость при этом представляет включение в многоуровневые модели описания механизма зернограницного скольжения.

Настоящая работа в основном посвящена решению вопросов, указанных в п.4 и п.5.

2. Двухуровневые статистические конститутивные модели

В главе описывается двухуровневая (макро- и мезоуровни) статистическая модель неупругого деформирования поликристаллических металлов и сплавов, базовая в многоуровневых моделях материалов (в гл.6 приводится ее расширение для случая учета большего числа механизмов деформирования). В п.2.1 приведена ее структура и классификация внутренних переменных и уравнений подмоделей каждого из рассматриваемых уровней в рамках используемого подхода, основанного на введении внутренних переменных (п.1.2). Соотношения для определения скорости неупругого деформирования кристаллита за счет внутризеренного дислокационного скольжения (ВДС) описываются в п.2.2: рассмотрены упругопластическая и упруговязкопластическая модели, подходы к формулировке эволюционных уравнений для критических напряжений – упрочнения на системах скольжения (СС) кристаллитов.

2.1. Структура двухуровневой модели для описания неупругого деформирования поликристаллов

При использовании многоуровневого подхода каждой материальной точке (ПО) на верхнем масштабном уровне ставится в соответствие неоднородная область на нижележащем масштабном уровне (рис.2.1.1); аналогично – для последующих масштабных уровней [145].

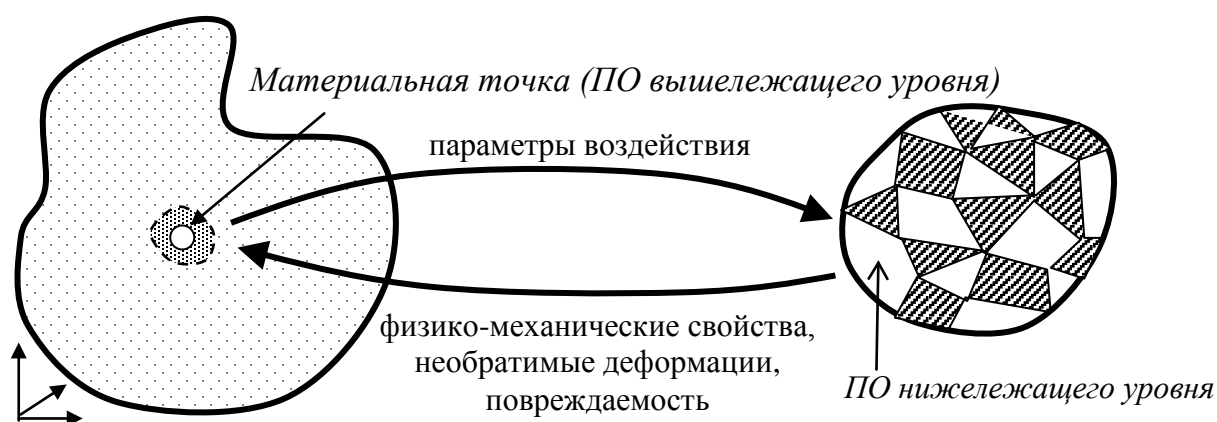


Рис. 2.1.1. Схема взаимодействия масштабных уровней [145]

На нижнем (в принятой иерархии разрабатываемой модели) масштабном уровне путем явного рассмотрения физических механизмов неупругого деформирования, реализующихся в результате приложенных воздействий, определяемых на верхнем масштабном уровне (на макроуровне – из решения краевой задачи), определяются параметры эволюционирующей структуры, текущие физико-механические свойства, характеристики повреждаемости и неупругие деформации, которые используются при уточнении отклика на вышележащем масштабном (или структурном) уровне.

При моделировании число рассматриваемых уровней определяется исследователем, исходя из анализируемого конкретного процесса, требуемой степени детализации, известных или предполагаемых механизмов деформирования. При моделировании неупругого деформирования поликристаллических металлов иерархию масштабных уровней можно определить следующим образом: макроуровень (уровень представительного макрообъема) – мезоуровень (уровень кристаллита (зерна, субзерна, фрагмента)) – микроуровень (дислокационная структура) (рис.2.1.2). В настоящее время наиболее часто используемыми при анализе деформирования поликристаллических металлов являются двухуровневые модели (п.1.3). Для описания более «тонкого» поведения поликристаллических материалов различных классов может потребоваться увеличение числа уровней (например, введение дополнительного структурного уровня для описания зернограничного скольжения – п.6.2, либо учет микромасштабного уровня для более детального описания взаимодействия элементов дефектной структуры).

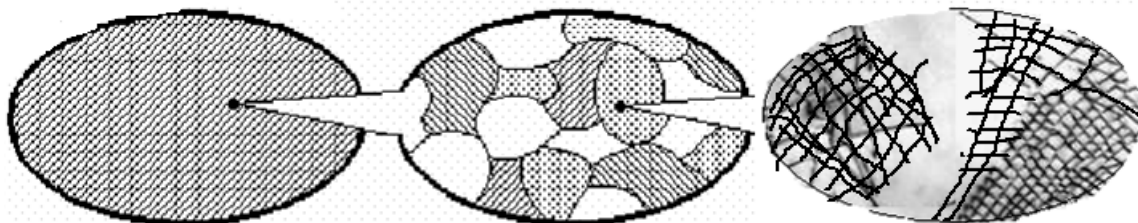


Рис. 2.1.2. Схематичное представление иерархии масштабных уровней при моделировании поликристаллических металлов (слева направо: макроуровень, мезоуровень, микроуровень) [145]

Тип соотношений для связи параметров различных масштабных уровней (способ назначения с вышележащего уровня параметров воздействия для модели нижележащего уровня и способ определения явных внутренних переменных верхнего уровня с помощью модели нижнего уровня) – один из классификационных признаков многоуровневых моделей. Модели можно разделить на три класса: статистические, самосогласованные и прямые (п.1.3).

С точки зрения моделирования реальных технологических процессов в настоящее время наиболее востребованы статистические конститутивные модели, являющиеся наиболее эффективными с точки зрения вычислительных затрат и обеспечивающие приемлемую точность описания процессов ТМО. По этой причине далее рассматриваются статистические модели поликристаллических металлов. Однако стоит заметить, что предлагаемые соотношения мезоуровня без изменений могут применяться в рамках прямых моделей для каждой точки интегрирования конечно-элементной сетки, описывающей зеренную структуру материала.

В качестве базовой модели используется двухуровневая статистическая модель для описания неупругого деформирования поликристаллов [145], включающая макроуровень (масштабный уровень, на котором в качестве ПО рассматривается поликристалл, состоящий из большого числа различно ориентированных кристаллитов (зерен, субзерен), и описывается отклик представительного макрообъема в среднем) и мезоуровень (масштабный уровень, на котором ПО является отдельный кристаллит (зерно, субзерно) и описывается его поведение за счет механизма ВДС). При этом важным отличием модели от традиционных статистических моделей ФТП является учет в рассматриваемой базовой модели взаиморасположения кристаллитов и границ между ними. Это позволяет принять во внимание несовместность движения дислокаций в соседних кристаллитах, накопление дислокаций ориентационного несоответствия (ДОН) в границе, что приводит к зернограничному упрочнению и дополнительным поворотам решетки (глава 6). Рассматриваемая в главе 6 модифицированная модель для сверхпластического деформирования [140] формально включает еще один – структурный – уровень для описания механизма зернограничного

скольжения (ЗГС), связывающий макромасштабный уровень (кинематическая реализация сдвигов ЗГС) и мезомасштабный уровень (учет состояния границ).

Если не указывается иное, то начальная конфигурация полагается естественной [103], функция распределения ориентаций решеток кристаллитов – равномерной (все возможные ориентации подвижной системы координат (ПСК) кристаллита относительно фиксированной лабораторной системы отсчета в начальный момент времени принимаются равновероятными), начальный размер кристаллитов обычно принимается одинаковым (разумеется, в качестве начальных условий можно принять любые данные, соответствующие экспериментальной информации). Поскольку модель – статистическая, то количество фасеток границ у кристаллитов в принципе можно выбрать любым, однако достаточно большим (не менее 10), что соответствует реальной топологии поликристаллических металлов. Обычно при реализации предлагаемых в настоящей работе моделей рассматривалось 26 фасеток границ у кристаллитов: принималось, что топология соответствует виртуальной кубической укладке зерен по типу кубика Рубика; ориентации фасеток границ распределены по равномерному или нормальному закону со средним математическим ожиданием, соответствующим направлению между центрами соседних кубов при данной укладке, площади фасеток принимаются или, в большинстве случаев для простоты, постоянными, или распределенными по равномерному или нормальному закону (конечно, в статистической модели может рассматриваться и другая укладка и/или меньшее число границ).

В предлагаемых конститутивных моделях параметрами процессов на каждом из масштабных (или структурных) уровней являются: меры напряженного состояния (и их объективные скорости изменения), меры скорости деформирования, температуры, внутренние (явные и неявные) переменные, определяющие состояние зеренной и дефектной структуры. На мезоуровне описываются механизм ВДС, ротации решеток кристаллитов, изменение формы и размеров кристаллитов.

Используется рассмотренный в главе 3 подход к формулировке геометрически нелинейных кинематических и ОС, основанный на рассмотрении в

рамках многоуровневого подхода разложения движения на мезоуровне с учетом симметрии материала. В каждом кристаллите вводится подвижная декартова ортогональная система координат (ПСК), движение которой считается квазитвердым [146] и которая привязывается к симметричным элементам кристаллита – кристаллографическому направлению и плоскости, содержащей это направление. Подробно соотношения описываются в главе 3, здесь они записываются в общем виде.

Рассмотрим общую структуру статистической модели в контексте формализма приведенного в п.1.2 подхода с внутренними переменными. Величины макроуровня обозначаются заглавными буквами, мезоуровня – строчными. В соответствии с аргументацией, подробно приведенной в главе 3, для моделирования технологических процессов, для которых характерны большие градиенты перемещений, формулировку соотношений конститутивной модели удобней осуществлять в скоростной форме в актуальной конфигурации.

Система соотношений на макромасштабном уровне имеет вид [145, 146]:

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{K}^{\text{cor}} \equiv \dot{\mathbf{K}} - \boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{K} + \mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\Omega} = \mathbf{P} : (\mathbf{L} - \boldsymbol{\Omega} - \mathbf{Z}^{\text{in}} - \mathbf{Z}^{\text{th}}), \\ \mathbf{P} = \mathbf{P}(\mathbf{p}_{(i)}, \boldsymbol{\omega}_{(i)}, \mathbf{z}_{(i)}^{\text{in}}, \mathbf{z}_{(i)}^{\text{th}}, \theta_{(i)}), i = 1, \dots, N, \\ \boldsymbol{\Omega} = \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{p}_{(i)}, \boldsymbol{\omega}_{(i)}, \mathbf{z}_{(i)}^{\text{in}}, \mathbf{z}_{(i)}^{\text{th}}, \theta_{(i)}), i = 1, \dots, N, \\ \mathbf{Z}^{\text{in}} = \mathbf{Z}^{\text{in}}(\mathbf{p}_{(i)}, \boldsymbol{\omega}_{(i)}, \mathbf{z}_{(i)}^{\text{in}}, \mathbf{z}_{(i)}^{\text{th}}, \theta_{(i)}), i = 1, \dots, N, \\ \mathbf{Z}^{\text{th}} = \mathbf{Z}^{\text{th}}(\mathbf{p}_{(i)}, \boldsymbol{\omega}_{(i)}, \mathbf{z}_{(i)}^{\text{in}}, \mathbf{z}_{(i)}^{\text{th}}, \theta_{(i)}), i = 1, \dots, N, \\ \mathbf{Q} = \mathbf{Q}(q_{(i)}), i = 1, \dots, N, \\ \mathbf{K}|_{t=0} = \mathbf{K}_0, \end{array} \right. \quad (2.1.1)$$

где \mathbf{K} – взвешенный тензор напряжений Кирхгоффа макроуровня, $\mathbf{K} = \left\langle \frac{\circ}{\rho / \hat{\rho}} \right\rangle \boldsymbol{\Sigma}$,

где $\boldsymbol{\Sigma}$ — тензор напряжений Коши макроуровня, $\left\langle \frac{\circ}{\rho / \hat{\rho}} \right\rangle$ — среднее отношение плотности в отсчетной и текущей конфигурации для кристаллитов, составляющих ПО макроуровня (согласно обобщенной гипотезе Фойгта эта величина для всех кристаллитов одинакова); $\mathbf{K}^{\text{cor}} \equiv \dot{\mathbf{K}} - \boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{K} + \mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\Omega}$ — не зависящая от выбора системы отсчета скорость изменения (коротационная производная) тензора

напряжений Кирхгоффа; \mathbf{K}_0 – начальное значение тензора макронапряжений, для естественной конфигурации $\mathbf{K}_0 = \mathbf{0}$. Тензор эффективных упругих свойств \mathbf{P} макроуровня, тензор спина ПСК макроуровня $\mathbf{\Omega}$, неупругая составляющая тензора скорости деформации \mathbf{Z}^{in} , термическая составляющая скорости деформации \mathbf{Z}^{th} и мощность источника Q (который необходимо использовать в уравнении теплопроводности краевой термомеханической задачи на уровне конструкции) являются явными внутренними переменными макроуровня, которые зависят от структуры на низших масштабных уровнях (а через нее – от истории нагружения) и определяются по характеристикам мезоуровня (неявным переменным макроуровня) с использованием процедуры согласования ОС макроуровня и мезоуровня [145], описанной в данном разделе далее; следует заметить, что запись зависимостей макропараметров от полного набора переменных мезоуровня (2.1.1)₂ – (2.1.1)₅ следует воспринимать символически: по части переменных – как функции, по другим – как функционалы над историей изменения параметров мезоуровня. С использованием указанных явных внутренних переменных макроуровня записывается связь отклика $\dot{\mathbf{K}}$ и воздействий – кинематического $\mathbf{L} = \hat{\nabla} \mathbf{V}^T(t)$ (градиента скорости перемещений) и термического $\Theta(t)$ (температура). Отметим, что при использовании многоуровневых моделей, как и любых других моделей материалов, для исследования НДС реальных конструкций необходимы постановка и решение соответствующей краевой задачи, в результате которого (при совместном рассмотрении определяющих и балансовых уравнений) и определяются поля воздействий и отклик. Постановка краевой задачи с использованием многоуровневой модели материала рассматривается в п.4.2. Переменные $\mathbf{P}_{(i)}, \mathbf{\omega}_{(i)}, \mathbf{Z}_{(i)}^{\text{in}}, \mathbf{Z}_{(i)}^{\text{th}}$ – тензор упругих свойств, спин ПСК, неупругая и термическая составляющая тензора скорости деформации мезоуровня вводятся для каждого кристаллита, N – число элементов мезоуровня, необходимых для статистического описания ПО макроуровня; эти переменные в соответствие со структурой конститутивных моделей, основанных на введении внутренних переменных

(п.1.2), относятся к неявным внутренним переменным макроуровня, в то же время (как следует из нижеизложенного) – к явным внутренним переменным мезоуровня.

Согласно упомянутой выше структуре конститутивной модели с внутренними переменными (п.1.2) уравнение (2.1.1)₁ является законом состояния (ОС). В качестве базового будет применяться упругое соотношение именно в скоростной форме с использованием тензоров, определенных в актуальной конфигурации, однако в п.4.1 обсуждаются и другие варианты.

В качестве эволюционных уравнений макроуровня выступают соотношения модели мезоуровня, которые в общем виде могут быть представлены следующей системой (применяются для каждого элемента мезоуровня, все величины принимаются однородными в пределах каждого элемента, индекс элемента для простоты записи опускается) [146]:

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{k}^{\text{cor}} \equiv \dot{\mathbf{k}} + \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\omega} - \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{k} = \mathbf{n} : (\mathbf{I} - \boldsymbol{\omega} - \mathbf{z}^{\text{in}} - \mathbf{z}^{\text{th}}), \\ \mathbf{I} = \hat{\nabla} \mathbf{v}^{\text{T}} = \hat{\nabla} \mathbf{V}^{\text{T}} = \mathbf{L}, \quad \theta = \Theta, \quad \dot{\theta} = \dot{\Theta}, \\ \mathbf{z}^{\text{in}} = \sum_{k=1}^K \dot{\gamma}^{(k)} \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)}, \\ \dot{\gamma}^{(k)} = [\text{соотношения для } \dot{\gamma}^{(k)}(\boldsymbol{\tau}^{(k)}, \boldsymbol{\tau}_c^{(k)}, \mathbf{o}, \theta, \boldsymbol{\beta}_i)], \quad k = 1, \dots, K, \\ \boldsymbol{\tau}^{(k)} = \mathbf{k} : \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)}, \quad k = 1, \dots, K, \\ \dot{\boldsymbol{\tau}}_c^{(k)} = [\text{соотношения для } \dot{\boldsymbol{\tau}}_c^{(k)}(\boldsymbol{\gamma}^{(k)}, \dot{\boldsymbol{\gamma}}^{(k)}, \mathbf{o}, \theta, \boldsymbol{\beta}_i)], \quad k = 1, \dots, K, i = 1, \dots, I, \\ \boldsymbol{\omega} = [\text{соотношения для } \boldsymbol{\omega}(\mathbf{I}, \mathbf{z}^{\text{in}}, \mathbf{z}^{\text{th}}, \boldsymbol{\gamma}^{(k)}, \dot{\boldsymbol{\gamma}}^{(k)}, \mathbf{o}, \theta, \boldsymbol{\beta}_i)], \quad \dot{\mathbf{o}} \cdot \mathbf{o}^{\text{T}} = \boldsymbol{\omega}, i = 1, \dots, I, \\ \mathbf{z}^{\text{th}} = \boldsymbol{\alpha} \dot{\theta}, \\ \mathbf{q} = \alpha \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{z}^{\text{in}} / \hat{\rho}, \\ \dot{\boldsymbol{\beta}}_i = [\text{соотношения для } \dot{\boldsymbol{\beta}}_i(\mathbf{I}, \mathbf{z}^{\text{in}}, \mathbf{z}^{\text{th}}, \boldsymbol{\gamma}^{(k)}, \dot{\boldsymbol{\gamma}}^{(k)}, \mathbf{o}, \theta, \boldsymbol{\beta}_i)], \quad i = 1, \dots, I, \\ \mathbf{k}|_{t=0} = \mathbf{k}_0, \quad \boldsymbol{\tau}_c^{(k)}|_{t=0} = \boldsymbol{\tau}_{c0}^{(k)}, \quad \boldsymbol{\gamma}^{(k)}|_{t=0} = \boldsymbol{\gamma}_0^{(k)}, \quad k = 1, \dots, K, \quad \mathbf{o}|_{t=0} = \mathbf{o}_0. \end{array} \right. \quad (2.1.2)$$

В приведенной системе уравнений:

$\mathbf{k} = \left(\frac{\circ}{\hat{\rho}} \right) \boldsymbol{\sigma}$ — взвешенный тензор напряжений Кирхгоффа мезоуровня; $\boldsymbol{\sigma}$ – тензор напряжений Коши мезоуровня; $\mathbf{k}^{\text{cor}} \equiv \dot{\mathbf{k}} + \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\omega} - \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{k}$ – не зависящая от выбора системы отсчета скорость изменения (коротационная производная) тензора напряжений Кирхгоффа;

$\boldsymbol{\omega}$ – тензор спина ПСК кристаллита, определяющий скорость ее поворота;

\mathbf{n} – тензор упругих свойств кристаллита (его компоненты постоянны в базисе ПСК кристаллита);

$\mathbf{l} = \hat{\nabla} \mathbf{v}^T$ – транспонированный градиент скорости перемещений, $\hat{\nabla}$ – оператор Гамильтона в текущей лагранжевой системе координат;

\mathbf{z}^{in} и \mathbf{z}^{th} – неупругая и термическая составляющие транспонированного градиента относительной скорости перемещений;

$\dot{\gamma}^{(k)}, \tau^{(k)}, \tau_c^{(k)}$ – скорость сдвига, действующее касательное и критическое касательное напряжение k -й СС;

$\mathbf{b}^{(k)}, \mathbf{n}^{(k)}$ – вектор направления и нормали к плоскости k -й СС;

α – тензор термического расширения (компоненты постоянны в базисе ПСК кристаллита);

q, α – мощность теплового источника и коэффициент выхода тепла;

β_i – дополнительные тензорзначные (произвольного ранга) внутренние переменные, вводимые при необходимости описания отличных от скольжения краевых дислокаций физических механизмов деформирования и изменения микроструктуры;

\mathbf{o} – тензор ориентации ПСК.

Уравнение (2.1.2)₁ – упругое ОС в скоростной релаксационной форме. В нем в качестве меры скорости упругой деформации (линейно связываемой наблюдателем в ПСК со скоростью изменения напряжений) принимается тензор $(\mathbf{l} - \mathbf{o} - \mathbf{z}^{\text{in}} - \mathbf{z}^{\text{th}})$ [138]. Вводимая мера скорости деформации рассматривается в п.3.2.

В качестве воздействий согласно (2.1.2)₂ помимо кинематического $\mathbf{l} = \mathbf{L}$ с макроуровня также передается температура Θ и скорость изменения температуры $\dot{\Theta}$ (как уже отмечалось выше, все воздействия на макроуровне определяются из решения краевой задачи на уровне конструкции). Отметим, что в большинстве многоуровневых статистических моделей используется расширенная гипотеза Фойгта (Тейлора) об однородности градиента скорости перемещений $\mathbf{l} = \mathbf{L}$ (глава 1). Как отмечалось выше, на текущем этапе развития вычислительной техники для решения задач моделирования технологических процессов целесообразно

использовать статистические модели, поскольку самосогласованные и тем более прямые (рассматривающие неоднородное НДС на мезоуровне) слишком ресурсоемки. Вместе с тем приведенная структура модели может использоваться и для исследования поведения ПО поликристаллов с применением прямых моделей, соответствующая постановка приведена в п.4.2.

Неупругая составляющая \mathbf{z}^{in} меры скорости деформации определяется соотношением (2.1.2)₃ по скоростям сдвигов $\dot{\gamma}^{(i)}$ краевых дислокаций по СС, которые известны для каждого типа кристаллической решетки, $\mathbf{b}^{(k)}, \mathbf{n}^{(k)}$ – единичные векторы направления скольжения и нормали к плоскости скольжения в актуальной конфигурации.

В качестве эволюционных соотношений (2.1.2)₄ для определения $\dot{\gamma}^{(i)}$ может использоваться или вязкопластическая, или пластическая модель (подробно описываются в п.2.2). В обоих случаях используются касательные напряжения на СС (2.1.2)₅ и критические напряжения, уравнения (2.1.2)₆ для изменения которых являются важной частью конститутивной модели (эти соотношения также обсуждаются в п.2.2).

Соотношения (2.1.2)₇ для определения спина ПСК, связанной с симметричными элементами мезоуровня, приводятся и анализируются в п.3.2, альтернативные уравнения для спина рассмотрены в п.4.1.

Термическая составляющая \mathbf{z}^{th} записывается в виде (2.1.2)₈, где $\boldsymbol{\alpha}$ – тензор термического расширения (его компоненты постоянны в ПСК). Мощность внутреннего теплового источника q , определяемая соотношением (2.1.2)₉ (α – коэффициент выхода тепла), так же, как и $\mathbf{k}, \mathbf{z}^{\text{in}}, \boldsymbol{\omega}, \mathbf{z}^{\text{th}}, \mathbf{p}$, передается на макромасштабный уровень (аргументы в правых частях (2.1.1)).

Тензорзначные (произвольного ранга) параметры β_i вводятся в качестве возможных дополнительных внутренних переменных мезоуровня, которые могут потребоваться в структуре модели для описания различных физических механизмов деформирования и перестройки микроструктуры, отличных от движения краевых дислокаций (например, концентрация примесных атомов, характеристики поврежденности и т.д.), при этом система уравнений дополняется

соответствующими эволюционными соотношения (2.1.2)₁₀. При необходимости в этом случае может быть увеличено число масштабных уровней, введены дополнительные структурные уровни на одних и тех же масштабных уровнях и т.д.

В частности, в ряде случаев (например, для детального анализа влияния на поведение материала зеренной структуры [365, 366]) система уравнений (2.1.2) должна быть дополнена соотношениями для параметров, характеризующих текущие форму и размеры зерна (в структуре (2.1.2) эти переменные входят в набор β_i). Совокупность этих параметров описывает текущее состояние зеренной структуры, от которого зависят параметры в соотношениях для определения вклада от различных механизмов деформирования. Отметим, что в классических статистических моделях зерна полагаются одинаковыми, при этом в них не вводятся характеристики формы зерен.

Одним из наиболее простых и ресурсно-экономичных вариантов учета в статистической модели формы зерен – принятие гипотезы об их эллипсоидальности. Поверхность произвольного зерна-эллипсоида характеризуется положительно определенным симметричным тензором второго ранга \mathbf{Z} : множество радиус-векторов \mathbf{r} , удовлетворяющих уравнению $\mathbf{r} \cdot \mathbf{Z} \cdot \mathbf{r} = 1$, описывают границу эллипсоида. Такой тензор обладает ортонормированной системой собственных векторов, которые одновременно являются осями эллипсоида. Соответственно, тензор \mathbf{Z} характеризуется тремя собственными числами (обратно пропорциональные квадратам полуосей эллипсоида) и ориентаций ортонормированного базиса собственных векторов относительно ортонормированной тройки векторов лабораторной системы отсчета. По известному кинематическому воздействию легко определяется текущая форма зерна в процессе деформирования. С использованием текущих значений внутренних переменных (формы зерна \mathbf{Z} , накопленных сдвигов и их скоростей по SS , ориентации зерна и кристаллической решетки относительно осей эллипсоида) и напряжений можно сформулировать тот или иной критерий измельчения зерна, дополнить модель описанием разделения зерна на несколько фрагментов. Создание соответствующих подмоделей (измельчения зеренной структуры, выход

на создание многоуровневых моделей разрушения) является одним из важнейших перспективных направлений развития механики материалов, в котором работает множество коллективов, включая коллектив, в который входит автор. Обозначенные вопросы находятся вне рамок данной работы, однако пример усложнения модели учетом изменения зеренной структуры за счет рекристаллизации при подготовке к сверхпластическому деформированию можно найти в главе 6.

В (2.1.2)₁₁ $\mathbf{k}_0, \tau_{c0}^{(k)}, \gamma_0^{(k)}, \mathbf{o}_0$ – начальные значения напряжений, критических сдвиговых напряжений, сдвигов, ориентации ПСК соответственно (при принятии естественной конфигурации в качестве отсчетной $\mathbf{k}_0 = \mathbf{0}, \gamma_0^{(k)} = 0$).

Классификация внутренних переменных макро- и мезоуровня приведена в таблице 2.1.1 [145].

Таблица 2.1.1

Параметры конститутивной модели поликристаллических металлов на разных масштабах

	Параметры воздействия	Параметры, используемые на рассматриваемом масштабном уровне		
		Явные внутренние переменные	Неявные внутренние переменные	Реакция материала
Макроуровень	$\hat{\nabla}\mathbf{V}^T, \Theta, \dot{\Theta}$	$\mathbf{P}, \Omega, \mathbf{Z}^{in}, \mathbf{Z}^{th}$	$\mathbf{p}, \omega, \mathbf{z}^{in}, \mathbf{z}^{th}$ (для каждого кристаллита)	\mathbf{K}, Q
Мезоуровень (для каждого кристаллита)	$\hat{\nabla}_{\mathbf{v}}^T = \hat{\nabla}\mathbf{V}^T,$ $\theta = \Theta, \dot{\theta} = \dot{\Theta}$	$\mathbf{p}, \omega, \mathbf{z}^{in}, \mathbf{z}^{th}$	$\gamma^{(k)}, \dot{\tau}_c^{(k)}, \mathbf{o}, \mathbf{Z}, \beta_i$	\mathbf{k}, q

При формулировке одним из ключевых является вопрос установления связей (2.1.1)₂ – (2.1.1)₅ между внутренними переменными разных масштабных уровней.

Как подробно отмечено в главе 3, с применением многоуровневого подхода в частности решается вопрос определения движения ПСК на макроуровне – спина Ω .

Внутренние переменные мезоуровня можно представить в виде суммы средних величин по ПО макроуровня и отклонения от этих средних [431]:

$$\begin{aligned} \mathbf{k} &= \langle \mathbf{k} \rangle + \mathbf{k}', & \mathbf{n} &= \langle \mathbf{n} \rangle + \mathbf{n}', & \boldsymbol{\omega} &= \langle \boldsymbol{\omega} \rangle + \boldsymbol{\omega}', \\ \mathbf{z}^{\text{in}} &= \langle \mathbf{z}^{\text{in}} \rangle + \mathbf{z}^{\text{in}'}, & \mathbf{z}^{\text{th}} &= \langle \mathbf{z}^{\text{th}} \rangle + \mathbf{z}^{\text{th}'}, \end{aligned} \quad (2.1.3)$$

где $\langle \rangle$ – оператор осреднения, который обладает следующим свойством:

$$\langle \mathbf{k}' \rangle = \mathbf{0}, \quad \langle \mathbf{n}' \rangle = \mathbf{0}, \quad \langle \boldsymbol{\omega}' \rangle = \mathbf{0}, \quad \langle \mathbf{z}^{\text{in}'} \rangle = \mathbf{0}, \quad \langle \mathbf{z}^{\text{th}'} \rangle = \mathbf{0}. \quad (2.1.4)$$

В качестве оператора осреднения, к примеру, может использоваться осреднение по объему или в пространстве ориентаций решеток кристаллитов; для оператора осреднения важно лишь выполнение свойства (2.1.4).

Подставляя (2.1.3) в соотношение (2.1.2)₁, получаем:

$$\begin{aligned} \langle \dot{\mathbf{k}} \rangle + \dot{\mathbf{k}}' + (\langle \mathbf{k} \rangle + \mathbf{k}') \cdot (\langle \boldsymbol{\omega} \rangle + \boldsymbol{\omega}') - (\langle \boldsymbol{\omega} \rangle + \boldsymbol{\omega}') \cdot (\langle \mathbf{k} \rangle + \mathbf{k}') &= \\ = (\langle \mathbf{n} \rangle + \mathbf{n}') : \left(\mathbf{I} - \langle \boldsymbol{\omega} \rangle - \boldsymbol{\omega}' - \langle \mathbf{z}^{\text{in}} \rangle - \mathbf{z}^{\text{in}'} - \langle \mathbf{z}^{\text{th}} \rangle - \mathbf{z}^{\text{th}'} \right). \end{aligned} \quad (2.1.5)$$

Применяя процедуру осреднения к соотношению (2.1.5), имеем:

$$\begin{aligned} \langle \dot{\mathbf{k}} \rangle + \langle \mathbf{k} \rangle \cdot \langle \boldsymbol{\omega} \rangle - \langle \boldsymbol{\omega} \rangle \cdot \langle \mathbf{k} \rangle + \langle \mathbf{k}' \cdot \boldsymbol{\omega}' \rangle - \langle \boldsymbol{\omega}' \cdot \mathbf{k}' \rangle &= \\ = \langle \mathbf{n} \rangle : \left(\mathbf{I} - \langle \mathbf{z}^{\text{in}} \rangle - \langle \mathbf{z}^{\text{th}} \rangle - \langle \boldsymbol{\omega} \rangle \right) + \langle \mathbf{n}' : (-\mathbf{z}^{\text{in}'} - \mathbf{z}^{\text{th}'} - \bar{\boldsymbol{\omega}}') \rangle. \end{aligned} \quad (2.1.6)$$

Напомним, что в структуре рассматриваемой двухуровневой модели используется передача кинематических воздействий с использованием обобщенной гипотезы Фойгта $\mathbf{I} = \mathbf{L}$, поэтому $\langle \mathbf{I} \rangle = \mathbf{I} = \mathbf{L}$. В связи с этой гипотезой (Фойгта) для напряжений и упругих характеристик макро- и мезоуровней принимаются следующие связи:

$$\mathbf{K} = \langle \mathbf{k} \rangle, \quad \mathbf{P} = \langle \mathbf{n} \rangle. \quad (2.1.7)$$

Соотношение (2.1.6) с использованием (2.1.7) представимо в виде:

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{K}} + \mathbf{K} \cdot \langle \boldsymbol{\omega} \rangle - \langle \boldsymbol{\omega} \rangle \cdot \mathbf{K} = \mathbf{\Pi} : \left(\mathbf{L} - \langle \mathbf{z}^{\text{in}} \rangle - \langle \mathbf{z}^{\text{th}} \rangle - \langle \boldsymbol{\omega} \rangle \right) + \\ + \left\langle \mathbf{\Pi}' : (-\mathbf{z}^{\text{in}'} - \mathbf{z}^{\text{th}'} - \boldsymbol{\omega}') \right\rangle - \langle \mathbf{k}' \cdot \boldsymbol{\omega}' \rangle + \langle \boldsymbol{\omega}' \cdot \mathbf{k}' \rangle. \end{aligned} \quad (2.1.8)$$

Сопоставляя соотношения (2.1.8) и (2.2.1)₁, можно получить следующие связи параметров для рассматриваемых уровней [431]:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\Omega} &= \langle \boldsymbol{\omega} \rangle, \\ \mathbf{Z}^{\text{in}} &= \langle \mathbf{z}^{\text{in}} \rangle + \mathbf{\Pi}^{-1} : \left\langle \mathbf{\Pi}' : \mathbf{z}^{\text{in}'} \right\rangle + \mathbf{\Pi}^{-1} : \left(\langle \mathbf{k}' \cdot \boldsymbol{\omega}' \rangle - \langle \boldsymbol{\omega}' \cdot \mathbf{k}' \rangle \right), \\ \mathbf{Z}^{\text{th}} &= \langle \mathbf{z}^{\text{th}} \rangle + \mathbf{\Pi}^{-1} : \left\langle \mathbf{\Pi}' : \mathbf{z}^{\text{th}'} \right\rangle. \end{aligned} \quad (2.1.9)$$

Использование прямых связей $\mathbf{K} = \langle \mathbf{k} \rangle$, $\mathbf{\Pi} = \langle \mathbf{\Pi} \rangle$ позволяет не прибегать к интегрированию ОС макроуровня (2.1.1)₁ – можно ограничиться интегрированием соотношений мезоуровня и использовать указанные связи. Однако следует заметить, что ОС макроуровня необходимо для постановки и решения краевой задачи на уровне конструкции (в постановке, приведенной в п.4.2).

В [145] приводится также альтернативный вариант процедуры согласования – при использовании для передачи воздействий с макроуровня на мезоуровень напряжений (гипотезы Рейсса). Отметим, что во многих работах при решении краевых задач с использованием статистических физических моделей пластичности на макроуровне методом конечных элементов используется линейная связь между приращением напряжений и приращением деформаций через изменяющийся тензор упругопластических свойств. Последний (в терминологии МКЭ) определяется либо как тензор модулей касательной жесткости, либо как тензор секущей жесткости. Задача поиска тензора секущей жесткости решается итерационно с использованием аналитического построения как начального приближения. Указанные построения можно выполнить и для предлагаемой модели [168], используя для аналитического определения тензора касательной жесткости явную схему интегрирования первого порядка (зарегистрирована разработанная с участием автора программа, реализующая конститутивную модель ГЦК-поликристалла в пакете Abaqus [50]), приближения для тензора секущей жесткости устанавливаются с помощью неявной схемы. Представляется, что формулировка с прямым определением напряжений

макроуровня из упругого закона $(2.1.1)_1$ с использованием предлагаемой процедуры согласования ОС двух соседних уровней более предпочтительна, поскольку в этом случае отсутствует необходимость проведения дополнительных итераций при решении краевой задачи.

Построенная с применением установленных связей между переменными макро- и мезоуровней $(2.1.9)$ и конкретизированных соотношений мезоуровня, обсуждаемых далее в главах 2 и 3, полная постановка задачи описания деформирования представительного макрообъема поликристаллического металла (сплава) на основе двухуровневой статистической модели приводится в п.4.2.

2.2. Соотношения для определения скорости неупругого деформирования кристаллита за счет внутризеренного дислокационного скольжения

Рассмотрим важнейшие соотношения модели $(2.1.2)_4$, используемые для описания неупругого деформирования кристаллитов за счет скольжения дислокаций.

Важнейшим механизмом неупругого деформирования является внутризеренное скольжение краевых дислокаций (ВДС). При этом плоскости залегания и ориентация векторов Бюргерса, вдоль которых осуществляется трансляционное движение (скольжение) краевых дислокаций известны, ими являются наиболее плотно упакованные плоскости и направления. В ГЦК–металлах скольжение краевых дислокаций осуществляется в плоскостях системы $\{111\}$ по направлениям $\langle 110 \rangle$; число таких возможных СС равно 12 (рис.2.2.1).

Рассмотрение движения отдельных дислокаций можно осуществить в рамках дислокационной динамики. В п.1.3 отмечены некоторые работы, в которых соотношения дислокационной динамики использованы в структуре многоуровневой модели для описания процессов на микроуровне, однако такие модели являются чрезвычайно ресурсоемкими, в связи с чем в большинстве исследований ограничиваются применением континуальных соотношений для эффективного (статистического) описания движения и взаимодействия дислокаций. Для этого вводятся скорости сдвигов по СС $\dot{\gamma}$, интегрально характеризующие движение дислокаций по СС, связанные со средней скоростью

движения дислокаций v и их плотностью ρ известным уравнением Орована [364]:

$$\dot{\gamma} = b\rho v.$$

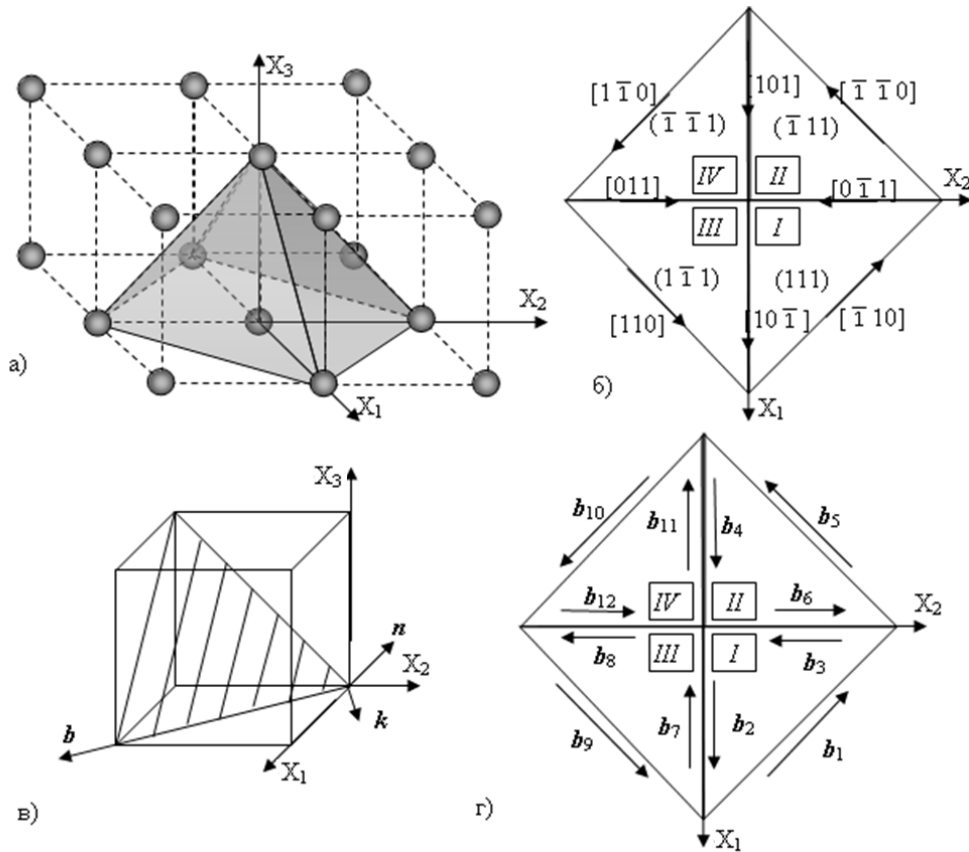


Рис.2.2.1. Расположение СС ГЦК-кристалла относительно ПСК (а – плоскости скольжения в соседних кубических ячейках, б – индексы Миллера направлений и плоскостей скольжения, в – система координат СС, г – векторы Бюргерса СС)

Ключевым элементом жесткопластических, упругопластических и упруговязкопластических моделей является установление условия активности СС (начала скольжения дислокаций), в качестве которого обычно используется закон Шмида (п.1.3):

$$\tau^{(k)} = \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)} : \mathbf{k} = \tau_c^{(k)}, \quad \sum_k \tau^{(k)} \leq \tau_c, \quad (2.2.1)$$

где $\tau^{(k)}$ – действующее в k -й СС касательное напряжение, $\mathbf{k} = \left(\frac{\rho}{\hat{\rho}} \right) \boldsymbol{\sigma}$ — взвешенный тензор напряжений Кирхгоффа мезоуровня, $\boldsymbol{\sigma}$ – тензор напряжений Коши для кристаллита (отметим, что в традиционных моделях в критерии Шмида используется преимущественно тензор Коши (п.1.3)), $\tau_c^{(k)}$ – критическое

напряжение сдвига в той же СС, зависящее от накопленных сдвигов по всем СС (уравнения для определения $\tau_c^{(k)}$ рассматриваются далее).

В силу того, что $I_1(\mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)}) = 0$, соотношение (2.2.1) представимо в виде

$$\tau_c^{(k)} = \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)} : \mathbf{k} = \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)} : \mathbf{k}' = \tau_c^{(k)}, \quad (2.2.2)$$

где \mathbf{k}' – девиатор взвешенного тензора напряжений Кирхгоффа \mathbf{k} для кристаллита. Закон Шмида (2.2.2) определяет поверхность (многогранник) текучести в пространстве напряжений.

Рассмотрим начальную поверхность текучести, когда $\tau_c = \tau_c(0) = \tau_{c0} = const$ (при отсутствии остаточных напряжений в начальной конфигурации). Требованием выполнения (2.2.2) для различных наборов по k СС из K (K – общее число СС) получаются различные системы уравнений для k неизвестных компонент девиатора тензора напряжений \mathbf{k}' . С помощью перебора (общее число систем уравнений равно числу сочетаний C_K^k) можно определить системы линейных уравнений и девиатор напряжений \mathbf{k}' , удовлетворяющий им. Физически реализуемые решения должны удовлетворять требованию нахождения изображающей точки в пространстве напряжений внутри или на поверхности текучести: $\mathbf{m}^i : \mathbf{k}' \leq \tau_c$ для каждой СС. Для активных систем (для которых выполняется равенство $\mathbf{m}^i : \mathbf{k}' = \tau_c$) решения описывают грани, ребра и вершины (различного порядка) поверхности текучести в пространстве напряжений.

Для ГЦК-кристаллита поверхность текучести имеет 56 вершин двух типов: с выполнением критерия Шмида в вершинах одновременно для 6 или для 8 СС (6-го и 8-го порядков) [304, 316]. При принятии $\tau_{c0} = 15$ МПа (медь) получены 32 вершины 6-го порядка, которым соответствуют интенсивности напряжений, равные 48.606 МПа и 55.114 МПа, и 24 вершины 8-го порядка, которым соответствуют интенсивности напряжений, равные 36.742 МПа, 45 МПа и 63.64 МПа [129, 170]. Полученные результаты использовались для проверки адекватности реализации вычислительных программ: при рассмотрении тестового случая без упрочнения изображающие точки в пространстве напряжений для каждого зерна поликристалла приходят в одну из определенных вершин высокого

порядка для упругопластической модели [129], в окрестности вершин – при применении упруговязкопластических моделей с высоким показателем степени [170].

Различают жесткопластические, упругопластические, вязкопластические и упруговязкопластические модели. Жесткопластические модели типа Тейлора – Бишопа – Хилла (ТБХ) обладают рядом недостатков [144] (неединственность определения скоростей сдвигов, неучет упругих деформаций, важных для анализа остаточных напряжений). Хотя рядом исследователей используются вязкопластические или вязкоупругие модели (без явного рассмотрения критерия течения, см. п.1.3), наиболее популярными являются упругопластические и упруговязкопластические модели.

Упругопластическая модель

В качестве преимущества упругопластических моделей по сравнению с упруговязкопластическими можно отметить большую скорость вычислений (интегрирование можно осуществлять с большим шагом), что, по-видимому, является основной причиной применения этих моделей по сей день (п.1.3). Стоит заметить, однако, что для упругопластических моделей характерны и существенные недостатки, например, сложности работы с анизотропным упрочнением, неединственность определения скоростей сдвигов, которые подробно описываются ниже.

В качестве базовой модели для описания ВДС использовалась модель Линя [59], в которой учитываются упругие деформации и анизотропия упругих свойств материала кристаллитов (отметим, что первоначально модель была предложена Линем для упруго-изотропных зерен). Хотя собственно упругими деформациями можно пренебречь в случае больших пластических деформаций, включение в рассмотрение упругих деформаций представляется необходимым исходя из потребности определения остаточных напряжений (второго рода), во многом определяющих прочностные характеристики материала, и накапливаемой упругой энергии [144]. Кроме того, модель Линя обладает другими преимуществами по сравнению с жесткопластическими моделями типа ТБХ:

– однозначное определение тензора напряжений по кинематическим характеристикам, поскольку в отличие от жестко-пластических моделей здесь не наложено условие несжимаемости;

– относительная простота реализации по сравнению с другими физическими моделями (в моделях типа ТБХ требуется решение оптимизационной задачи [144]), что существенно повышает эффективность модели при решении реальных краевых задач;

– возможность определения последовательности вовлечения в пластическое деформирование СС, что позволяет частично снять проблему неединственности определения набора активных СС.

Отметим, что первоначально модель была предложена Линем для малых градиентов перемещений. Поскольку целью применения многоуровневых моделей материалов является описание процессов интенсивного пластического деформирования со значительным изменением структуры, когда предположение о малости градиентов перемещений неприменимо, необходимо использовать геометрически нелинейную модификацию модели Линя – с использованием упругих соотношений (2.1.2)₁.

Основная идея модели Линя заключается в точном обеспечении движения изображающей точки в пространстве напряжений внутри или по поверхности многогранника текучести с точным определением активных в текущий момент СС. Для известного, определенного согласно нижеприведенному алгоритму, набора активных СС в текущий момент времени соотношения для определения скоростей сдвигов в скоростной форме имеют вид (рассматривается случай изотропного упрочнения):

$$\frac{d}{dt} \tau^{(k)} = \frac{d}{dt} (\mathbf{b}^{(s)} \mathbf{n}^{(s)} : \mathbf{k}) = \tau'_c(\gamma_\Sigma) \sum_{i=1}^{K_a} \dot{\gamma}^i, \quad s = 1, \dots, K_a, \quad (2.2.3)$$

где $\gamma_\Sigma = \sum_{i=1}^K \gamma^i$ – суммарный накопленный сдвиг по всем СС, K – удвоенное число

СС кристаллита, $\tau_c^{(k)} = \tau_c(\gamma_\Sigma)$, $k = 1, \dots, K$, $\tau'_c(\gamma_\Sigma) = \frac{\partial \tau_c}{\partial \gamma_\Sigma}$, K_a – число активных СС.

Соотношения (2.2.3) обеспечивают равенство скорости изменения касательных

напряжений на активных СС скорости изменения критических напряжений. Отметим, что под t в (2.2.3) понимается неубывающий параметр.

Существенной составляющей модели Линя является алгоритмическое определение активных СС, что нетрудно видеть из приведенного ниже описания алгоритма её численной реализации [144].

Весь интервал нагружения (деформирования) представляется совокупностью достаточно малых шагов по времени или неубывающему параметру (величина шага, вообще говоря, определяется в серии численных экспериментов). Пусть на начало данного $(n+1)$ -го (конца n -го) шага для рассматриваемого зерна известны все величины: определяющий ориентацию ПСК относительно лабораторной системы координат на начало шага тензор $\mathbf{o}^{(n)}$, накопленные пластические сдвиги $\gamma^{k(n)}$, критические напряжения по СС ВДС $\tau_c^{k(n)}$, напряжение $\mathbf{k}^{(n)}$, а также вектор номеров $\mathbf{k}_{акт}$ СС, которые были активны на конец предыдущего шага. Кроме того, согласно принимаемой расширенной гипотезы Фойгта известны значения градиента скорости в любой момент времени на текущем шаге $\hat{\nabla}\mathbf{v}^{(i)} = \hat{\nabla}\mathbf{V}^{(i)}$, $t_n \leq t_i \leq t_{n+1}$, $i = 1, \dots, I$.

Для определения неизвестных приращений сдвигов $\Delta\gamma^j$, $j = 1, \dots, K_a$, по активным СС на рассматриваемом шаге по времени применяется соотношение (2.2.3) в приращениях:

$$\mathbf{b}^{(s)} \mathbf{n}^{(s)}: \Delta\mathbf{k}(\Delta\gamma^j) = \tau'_c(\gamma_\Sigma) \sum_{p=1}^{K_a} \Delta\gamma^p, \quad s, j = 1, \dots, K_a, \quad (2.2.4)$$

В (2.2.4) $\mathbf{b}^{(s)} \mathbf{n}^{(s)}$ – известный на начало шага ориентационный тензор СС, $\Delta\mathbf{k}(\Delta\gamma^j)$ – приращение тензора напряжений, записанное как функция от приращений сдвигов с использованием упругого соотношения и определения пластических деформаций в предположении неизменности ориентации ПСК на шаге (поворот ПСК за шаг осуществляется после нахождения приращений сдвигов $\Delta\gamma^j$, при этом повороте компоненты напряжений полагаются «замороженными» в базисе ПСК; указанное приближение используется, поскольку интегрирование совместной системы для нетривиальной модели поворота представляется затруднительным

ввиду сложности уравнений для определения поворота на шаге, однако и последнее возможно, например, с использованием метода Ньютона – Рафсона). Довольно простой вид $\Delta \mathbf{k} (\Delta \gamma^j)$ принимает для наблюдателя в ПСК:

$$\mathbf{b}_i^{(s)} \mathbf{n}_j^{(s)} \bar{\pi}_{ijkl} (\Delta \bar{\epsilon}_{lk} - \sum_{p=1}^{K_a} \mathbf{b}_l^{(p)} \mathbf{n}_k^{(p)} \Delta \gamma^p) = \tau'_c (\gamma_\Sigma) \sum_{p=1}^{K_a} \Delta \gamma^p, \quad s = 1, \dots, K_a, \quad (2.2.5)$$

где все компоненты определены в базисе ПСК, $\Delta \bar{\epsilon}_{lk}$ – компоненты тензора приращения деформации в базисе ПСК, $\Delta \bar{\epsilon}_{lk} = \Delta t \left[\hat{\mathbf{V}} \mathbf{v}^T(t_n) - \boldsymbol{\omega}(t_n) \right]_{lk}^{\text{ПСК}}$, $\left[\hat{\mathbf{V}} \mathbf{v}(t_n) \right]_{lk}^{\text{ПСК}}$ – компоненты в базисе ПСК транспонированного градиента скорости перемещений на начало шага, $\left[\boldsymbol{\omega}(t_n) \right]_{lk}^{\text{ПСК}}$ – компоненты в базисе ПСК спина на начало шага.

Процедура реализации модели Линя организована таким образом, что при активном нагружении изображающая точка в пространстве напряжений (ИТН) должна постоянно находиться в течение шага нагружения на поверхности многогранника текучести (рис.2.2.2), при этом последний в общем случае может трансформироваться.

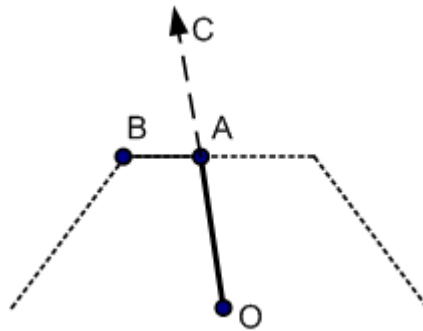


Рис.2.2.2. Схема движения изображающей точки в пространстве напряжений. Пунктирной линией изображена поверхность текучести. Схематично приведены характерные участки траектории нагружения: луч ОС – для упругого, ОАВ – для упругопластического деформирования

Наложим на зерно предписанное на шаге деформирование со скоростью кинематического воздействия $\hat{\mathbf{V}} \mathbf{v}(t)$, $t^{(n)} \leq t \leq t^{(n+1)}$. Далее расчет производится по следующему алгоритму [144].

1) Упругий предвестник

Решается задача определения НДС кристаллита в предположении, что нет активных СС. Определяются касательные напряжения, действующие на конец шага на площадках, совпадающих с плоскостями скольжения ВДС.

При превышении касательными напряжениями критических напряжений на СС, бывших активными на предыдущем шаге, осуществляется переход к пункту 2 (такие СС принимаются активными на всем шаге). Если таких СС нет, но касательные напряжения превышают критические на СС, не являющихся активными ранее – переход к пункту 3. Если касательные напряжения не превышают критические на всех СС, расчет шага завершается.

2) Расчет с набором СС, активных на всем шаге

Согласно (2.2.5) определяются приращения сдвигов по СС, активным на всем текущем шаге (эти СС определены в п.1), анализируются касательные напряжения, действующие на конец шага на площадках, совпадающих с плоскостями скольжения ВДС. (Если получились отрицательные приращения сдвигов, то следует переопределить набор активных СС: если есть другие потенциально активные СС, то в набор активных СС вводится одна или несколько из них взамен старых, если нет – уменьшается число активных СС.)

Если суммарное число активных линейно-независимых СС ВДС меньше 5, то возможна активация СС ВДС, не бывших активными на начало шага. В случае, если есть СС, не являющаяся активной на начало шага и для которой выполняется критерий Шмида при условии линейной независимости с текущим набором СС ВДС, то эта СС на данном шаге (подшаге) становится активной (назовем такую СС «новой»). Стоит отметить, что таких СС может быть несколько. Наиболее корректным представляется разбиение шага на подшаги, чтобы последовательно «активизировать» СС в модели, что представляется соответствующим принятой упругопластической теории – ИТН должна постоянно находиться в течение шага нагружения на поверхности многогранника текучести.

В случаях, когда «потенциально активных» («новых») СС нет, расчет НДС на данном шаге завершается, в противном случае требуется выполнить п.3 алгоритма.

3) Последовательная активация СС

Необходимо из «новых» СС, т.е. тех, для которых на начало шага критерий активности не выполнялся, но расчет согласно пункту 1 или пункту 2 свидетельствует о выполнении условия активности на конец шага, выбрать ту СС, которая активизируется первой из «новых» – например, СС j^* , на которой наблюдается максимальное превышение касательными напряжениями критических при операциях пункта 2 (или пункта 1, в зависимости от того, с какого пункта осуществлен выход на пункт 3).

Тогда приходим к задаче нахождения корня нелинейного уравнения

$$f(\alpha) = \tau^{(j^*)}(\alpha) - \tau_c^{(j^*)}(\alpha) = 0, \quad (2.2.6)$$

где $\tau^{(j^*)}(\alpha)$ – касательное напряжение на СС j^* , $\tau_c^{(j^*)}(\alpha)$ – критическое напряжение для СС j^* (для СС j^* при сдвигах по другим СС происходит латентное упрочнение), оба значения вычисляются на конец подшага α , $\alpha \in [0,1]$ со «старым» набором СС. В результате решения (2.2.6) определяется подшаг α , соответствующий моменту активации «новой» СС j^* . Задачу установления величины доли шага α , $\alpha \in [0,1]$, определяемой решением (2.2.6), можно найти методом деления отрезка пополам. При этом точность решения (отличие значений функций справа и слева в (2.2.6)) определяется шириной (узкого) интервала, при попадании в который критическое напряжение можно принять равным значению на середине интервала. Очевидно, что нельзя исключать возможности парной или множественной «единовременной» активации СС (при определенных ориентациях зерна такая ситуация неизбежна – например, в случае одноосного растяжения ГЦК кристалла вдоль любой кристаллографической оси), вариант алгоритма для такой ситуации предложен ниже.

После определения величины подшага α , $\alpha \in [0,1]$ рассчитывается НДС зерна на конец подшага согласно п.2 с постоянно активными («старыми») СС на подшаге $[t^{(n)}, t^{(n)} + \alpha\Delta t]$. На оставшейся части шага $[t^{(n)} + \alpha\Delta t, t^{(n+1)} = t^{(n)} + \Delta t]$ СС j^* принимается активной, для расчета НДС на конец шага используется соответствующая система уравнений п.2. Заметим, при этом возможно разбиение этого (завершающего шаг) подшага на части аналогичным образом.

Примечание. Для случая нелинейного упрочнения необходима итерационная процедура, чтобы для активных СС условие Шмида точно выполнялось на конец шага. Для этого в случае наличия потенциально активных СС, определяемых на упругом шаге согласно пункту 1, находится β – корень уравнения (для изотропного упрочнения):

$$\tau_{akt}^{(n+1)}(\beta) = \tau_c(\gamma_\Sigma^{(n+1)}(\beta)), \quad (2.2.7)$$

где $\tau_{akt}^{(n+1)}(\beta)$ – касательное напряжение на активных СС на конец шага, $\tau_c(\gamma_\Sigma^{(n+1)}(\beta))$ – критическое напряжение на конец шага. Здесь β – коэффициент в линейной аппроксимации закона упрочнения $g(\gamma_\Sigma) = \tau_c^{(n)} + \beta \Delta\gamma_\Sigma$ при расчете текущего шага, $\Delta\gamma_\Sigma$ – суммарное приращение сдвига на шаге. Таким образом, нелинейная зависимость критических напряжений от суммарных сдвигов будет аппроксимирована линейными зависимостями на каждом шаге (рис.2.2.3).

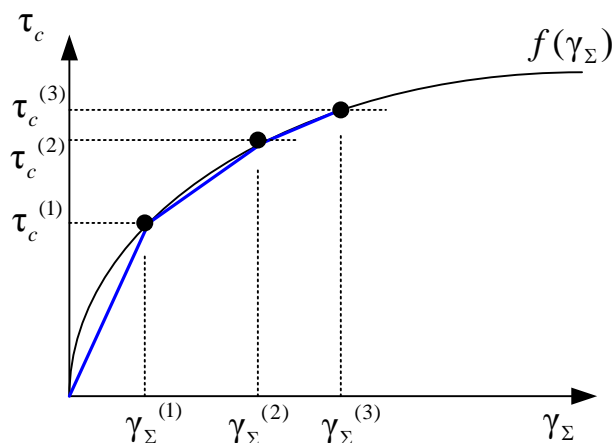


Рис.2.2.3. Условная диаграмма упрочнения $\tau_c = f(\gamma_\Sigma)$

Коэффициент β , обеспечивающий выполнение (2.2.7) (иначе говоря, доставляющий нулевое значение функции $h(\beta) = \tau_{akt}^{(n+1)}(\beta) - f(\gamma_\Sigma^{(n+1)}(\beta))$), ищется методом деления отрезка пополам. При каждом рассматриваемом в процессе решения уравнения (2.2.7) текущем значении β^* выполняются пункты 2–3 (в конце шага определяется значение $h(\beta^*) = \tau_{akt}^{(n+1)}(\beta^*) - f(\gamma_\Sigma^{(n+1)}(\beta^*))$). Коэффициент β , доставляющий нуль этой функции, позволит точно обеспечить выполнение закона Шмида для всех СС на конец шага (рис.2.2.3), используя уравнения (2.2.4)

– в правой части (2.2.4) используется линейная аппроксимация кривой упрочнения текущей.

В результате реализации описанной итерационной процедуры, позволяющей последовательно вовлекать СС в число активных, на конец шага будем иметь набор значений, описывающих НДС зерна: $\gamma^{k(n+1)}$, $\mathbf{k}^{(n+1)}$, вектор номеров активных СС $\mathbf{k}_{акт}^{(n+1)}$. Заметим, что значительное число итераций требуется лишь для очень резких изменений траекторий деформирования, т.к. итерации необходимы только при наличии на шаге «новых» СС.

Необходимо отметить, что в случаях специальных ориентировок кристаллита проявляется проблема неединственности выбора активных СС. Например, при рассмотрении одноосного растяжения ГЦК-монокристалла (алгоритм реализации одноосного растяжения приведен в 5.1), в случае нахождения проекции направления растяжения в вершине [001] и [111] стереографического треугольника необходимо выбрать 5 активных СС. Однако ни в моделях типа ТБХ, использующих принципа минимума сдвига или принцип максимума мощности, ни в модели Линя (в силу одновременного выполнения критерия на 8 или 6 СС сразу, так как ИТН выходит на многогранник текучести именно в вершине), единственный набор активных систем скольжения для рассматриваемого случая не определяется. Это порождает неоднозначное описание поворотов решетки (явно зависящих от сдвигов) и, как следствие, – неоднозначное описание НДС зерна.

Если принимать за исходное положение теории критерий Шмида как физический критерий движения дислокаций по СС, то все СС, для которых он выполнен, равноправны и, по существу, искусственное ограничение движения дислокаций по некоторым СС не соответствует принятой физической картине процесса пластического деформирования. Отметим, что и в случае нахождения проекции направления растяжения на стороне стереографического треугольника обе активные СС должны быть равноправны и, с физической точки зрения, сдвиги (скорости сдвигов) по ним должны быть равными по величине (при изотропном упрочнении). Между тем, при попытке определения в рамках модели Линя

различных приращений сдвигов по двум СС при нахождении проекции направления растяжения на стороне треугольника, или различных приращений сдвигов по четырем СС (проекция направления растяжения в вершине треугольника [101]), или различных приращений сдвигов по пяти системам скольжения (проекция направления растяжения в вершине [001] или [111]) оказалось, что в случае изотропного упрочнения система (2.2.4) становится вырожденной (число обусловленности порядка 10^{20}). Таким образом, модель Линя в предложенной выше модификации, равно как и модели типа ТБХ, не может применяться для моделирования одноосного растяжения при специальной ориентировке зерна вследствие как математических проблем, так и противоречия физической симметрии. Это порождает сомнения и в её применимости при моделировании произвольных нагрузений. В качестве варианта преодоления указанной сложности наиболее естественным представляется способ, заключающийся в том, что при принятии изотропного упрочнения по всем одновременно (близко по времени) активируемым системам скольжения должны проходить одинаковые сдвиги [128] (до выхода той или иной СС из числа активных). Результаты использования модифицированной модели Линя с различными законами упрочнения и моделями ротации решетки для описания поведения монокристаллов и поликристаллов при различных видах нагружения представлены в статьях [126, 128, 129].

Стоит отметить, что, несмотря на существенное преимущество по ресурсоемкости перед упруговязкопластическими моделями, упругопластические, в том числе наиболее развитые из них (в частности, изложенная здесь модификация модели Линя), обладают существенными недостатками (некоторые из них представляются непреодолимыми): сложностью алгоритмической и программной реализации, особенно для случаев с неанизотропным упрочнением по СС, и главным – ограниченностью диапазона применения, так как из рассмотрения исключаются вязкие эффекты, характерные для интенсивных пластических деформаций, особенно – при повышенных температурах. Поэтому после 2010 г. в структуре многоуровневых моделей материалов, разрабатываемых

и используемых коллективом, в который входит автор, использовалась упруговязкопластическая модель мезоуровня.

Упруговязкопластическая модель

Для установления скоростей сдвигов на СС применяется одна из известных моделей вязкопластичности [191, 192, 284, 285] со степенным законом вида:

$$\dot{\gamma}^{(k)} = \dot{\gamma}_0 \left(\frac{\tau^{(k)}}{\tau_c^{(k)}} \right)^m H(\tau^{(k)} - \tau_c^{(k)}), \quad (2.2.8)$$

где $\tau^{(k)}$, $\tau_c^{(k)}$ – сдвиговое и критическое сдвиговое напряжение на k -й СС, $\dot{\gamma}_0$ – скорость сдвига по СС при достижении касательным напряжением критического напряжения сдвига, m – показатель скоростной чувствительности материала, $H(\cdot)$ – функция Хэвисайда.

В п.1.3 рассмотрены альтернативные формулировки вязкопластических соотношений для определения скоростей сдвигов. Во многих работах в соотношении (2.2.8) для учета чувствительности отклика к температуре добавляется множитель $\exp\left(-\frac{U}{k\theta}\right)$, k – константа Больцмана, U – параметр модели (энергия активации). Альтернативой является подход учета чувствительности к температуре за счет либо определения параметров $\dot{\gamma}_0$, m зависящими от температуры функциями [260], либо формулировки соответствующих соотношений для критических напряжений $\tau_c^{(k)}$ [209]. Конечно, в любом случае начальные значения $\tau_c^{(k)}(0)$ должны зависеть от температуры.

Для учета зависимости напряжений от скорости деформаций в ФТП используются следующие варианты.

В большинстве работ принимается $\dot{\gamma}_0 = const$, тогда скоростная чувствительность определяется параметром m . Необходимо отметить, что значение $\dot{\gamma}_0$ должно быть меньше нижней границы скорости деформации из рассматриваемого диапазона во избежание «пилообразной» зависимости напряжений от деформации; следует также иметь в виду наличие взаимосвязи в

в общем случае параметров $\dot{\gamma}_0$ и m между собой. При значительных m упруговязкопластическая модель «приближается» к упругопластической – в том смысле, что соотношение (2.2.8) диктует необходимость нахождения ИТН в малой окрестности поверхности текучести: при попытке существенного удаления вне ее реализуется значительная релаксация напряжений с возвратом ИТН к поверхности текучести [170].

Альтернативно для определения $\dot{\gamma}_0$ может использоваться соотношение

$$\dot{\gamma}_0 = \eta D_u, \quad D_u = \sqrt{\frac{2}{3} \mathbf{D}' : \mathbf{D}'}$$

– интенсивность скорости деформации, \mathbf{D}' – девиатор тензора деформации скорости \mathbf{D} , η – параметр модели (обычно $\eta = 1$) [209, 252]. В этом случае для активных СС касательные напряжения стремятся к критическим [252]. Чувствительность отклика к скорости деформации при таком подходе закладывается в эволюционные соотношения для критических напряжений $\tau_c^{(k)}$.

Вариант модели с $\dot{\gamma}_0 = const$ и добавлением множителя $\exp\left(-\frac{U}{k\theta}\right)$ в (2.2.8)

вполне применим при исследованиях процессов нагружения с примерно постоянной скоростью деформации и незначительными изменениями температуры; в настоящей работе приведены результаты исследования деформирования, полученные с использованием данной формулировки, однако для исследования процессов ТМО изделий сложной конфигурации (т.е. создания «широкодиапазонной» модели материала) более перспективным представляется подход с учетом чувствительности отклика и к температуре, и к скорости деформации в эволюционных уравнениях для критических напряжений (с использованием простого соотношения (2.2.8)). Это делает более ясной трактовку внутренних переменных $\tau_c^{(k)}$ и соотношений для них, упрощает процедуру идентификации. В трехуровневой модели для описания как сверхпластического деформирования, так и подготовки к нему (глава 6) использовался именно этот вариант учета скоростной и температурной чувствительности.

Поскольку упруговязкопластическая модель мезоуровня используется в составе многоуровневых моделей, она включена в соответствующую постановку

п.4.2, а алгоритм ее реализации входит в состав алгоритма полной модели, изложенного в п.5.1.

Важнейшим фактором, определяющим поведение материала при использовании любых соотношений для установления скоростей сдвигов, являются критические напряжения сдвигов. Рассмотрим далее эволюционные уравнения для них.

Эволюционные уравнения для критических напряжений

Как отмечено в п. 1.3, формулировке закона упрочнения посвящено множество работ по развитию ФТП [230, 244, 295, 296, 305, 411, 423, 459, 465 и др.]. Связано это с тем, что в рамках многоуровневых моделей именно критические напряжения сдвигов по СС $\tau_c^{(k)}$ являются теми весьма важными внутренними переменными, которые характеризуют сопротивление дефектной структуры движению дислокаций, следовательно, их изменение должно быть связано с изменением дефектной структуры. В связи с тем, что в деформируемом твердом теле реализуется множество механизмов деформирования и сценариев их взаимодействия, построение математических описаний этого и включение в математические модели материалов, которые можно использовать при исследовании реальных технологических процессов, является сложной задачей на стыке ФТТ и МДТТ.

Как и для любых задач подобного класса, применяются различные подходы к решению указанной задачи. Хотя вопрос построения соотношений для упрочнения находится за рамками данной работы, для общности изложения кратко охарактеризуем их, ранжируя от более простых к более сложным (как по математической структуре соотношений, так и по требованиям к вычислительным ресурсам) и рассматривая в основном используемые соотношения (обзор альтернативных соотношений приведен в п.1.3).

Наиболее простой вариант: не расширяя набора внутренних переменных, сформулировать эволюционные соотношения для критических напряжений сдвигов по СС $\tau_c^{(k)}$ в виде функций накопленных сдвигов и текущих скоростей

сдвигов по СС. Примером соотношения такого типа служит известный закон упрочнения [183, 217]:

$$\dot{\tau}_c^{(k)} = \sum_{l=1}^K h^{(kl)} \dot{\gamma}^{(l)}, \quad (2.2.9)$$

$$h^{(kl)} = \left[q_{lat} + (1 - q_{lat}) \delta^{(kl)} \right] h^{(l)}, \quad h^{(l)} = h_0 \left| 1 - \tau_c^{(l)} / \tau_{sat} \right|^a,$$

где $\delta^{(kl)}$ — дельта Кронекера; h_0, τ_{sat}, a — параметры модели (для поликристаллической меди $h_0 = 180$ МПа, $\tau_{sat} = 148$ МПа, $a = 2.25$, начальные значения критических напряжений для всех СС $\tau_c^{(k)}(0) = \tau_{c0} = 16$ МПа, $k = 1, \dots, K$). В (2.2.9) учтен известный эффект превышения латентным упрочнением деформационного: параметр латентного упрочнения q_{lat} принимает значение 1 для компланарных и значение 1.4 для некомпланарных СС (с номерами k и l). Фактически (2.2.9) является феноменологическим соотношением, позволяющем описать экспериментальные данные, в частности — «насыщение» напряжения течения, уровень при котором оно происходит, определяет параметр τ_{sat} .

Усовершенствование модели упрочнения осуществляется путем усложнения формы соотношений явной декомпозицией правой части на составляющие, ответственные за отдельные механизмы взаимодействия элементов дефектной структуры, при необходимости модель дополняется соответствующими внутренними переменными. Например, можно принять следующий вид закона упрочнения для каждой из СС [145]:

$$\begin{aligned} \dot{\tau}_c^{(k)} = & f^{(k)}(\gamma^{(i)}, \dot{\gamma}^{(i)}) + f_{ЛК}^{(k)}(\gamma^{(i)}, \dot{\gamma}^{(i)}; \alpha_1^{(i)}, \alpha_2^{(i)}, \dots, \alpha_n^{(i)}) + \\ & + f_{ан}^{(k)}(\gamma^{(i)}, \dot{\gamma}^{(i)}; \beta_1^{(i)}, \beta_2^{(i)}, \dots, \beta_m^{(i)}) + \\ & + f_{ЗГВ}^{(k)}(\gamma^{(i)}, \dot{\gamma}^{(i)}; \delta_1^{(i)}, \delta_2^{(i)}, \dots, \delta_p^{(i)}), \quad i, k = \overline{1, K}, \end{aligned} \quad (2.2.10)$$

где $\alpha_1^{(i)}, \alpha_2^{(i)}, \dots, \alpha_n^{(i)}$; $\beta_1^{(i)}, \beta_2^{(i)}, \dots, \beta_m^{(i)}$ и $\delta_1^{(i)}, \delta_2^{(i)}, \dots, \delta_p^{(i)}$ — наборы внутренних переменных, характеризующих соответствующие механизмы (вообще говоря, принимающие различные значения в каждый момент деформирования для разных СС).

В качестве основного слагаемого $f^{(k)}(\gamma^{(i)}, \dot{\gamma}^{(i)})$, описывающего упрочнение за счет леса дислокаций (образование пересечений дислокаций, жгутов, кос), можно

использовать модифицированный (для учета сложности предшествующего нагружения) степенной закон вида [145]:

$$f^{(k)} = A \left(\frac{\sum_{i=1}^K a_i^{(k)} (\gamma^{(i)})^\psi \dot{\gamma}^{(i)}}{\left(\sum_{j=1}^K \gamma^{(j)} \right)^\delta} \right), k = 1, \dots, K, \quad (2.2.11)$$

где $A, \psi, \delta, a_i^{(k)}$ – параметры материала (положительные числа), в начальном состоянии ($\gamma^{(i)} = 0$) множитель $\gamma^{(i)} / \sum_{j=1}^{24} \gamma^{(j)}$ принимается равным 1. Под знаком суммы в (2.2.11) учитывается комплекс величин: отношение накопленного сдвига в данной системе к суммарному накопленному сдвигу. Очевидно, что в случае одиночного скольжения этот множитель независимо от степени будет равен единице и скорость упрочнения останется пропорциональна скорости сдвига. Наоборот, чем большее количество различных СС будет подключаться к процессу скольжения, тем ближе этот множитель будет к нулю, причем с увеличением степени стремление к нулю будет большим.

Второе слагаемое в (2.2.10) описывает дополнительное упрочнение за счет образования барьеров Ломера–Коттрелла, его возможный вид [145]:

$$f_{LK}^{(i)}(\gamma_{ЭДУ}, \dot{\gamma}^{(i)}, \gamma^{(j)}) = \xi_1 \tau_c^{(i)} \left(1 - \frac{\gamma_{ЭДУ}}{\gamma_{ЭДУ}^*} \right) H \left(1 - \frac{\gamma_{ЭДУ}}{\gamma_{ЭДУ}^*} \right) \left(\int_0^t f_{LK}^{(i)} d\tau + f_0^{(i)} \right)^{-1} \dot{\gamma}^{(i)} \left(\sum_{j \neq i}^{N^*} \gamma^{(j)} + \gamma_0^b \right), \quad (2.2.12)$$

где $\gamma_{ЭДУ}$ – ЭДУ материала, $\gamma_{ЭДУ}^*$ – критическое значение ЭДУ материала, N^* – число СС, сопряженных к данной (т.е. расщепленные дислокации которых могут вступать в реакцию с дислокациями рассматриваемой системы с образованием сидячих дислокаций), γ_0^b, ξ_1 – параметры материала, H – функция Хэвисайда.

Для учета возможной аннигиляции дислокаций, «поджатых» на препятствиях, в том числе при смене направления деформирования, введено третье слагаемое $f_{ан}^{(i)}$ вида (возможный вариант для ГЦК-кристаллита) [145]:

$$f_{an}^{(i)}(\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_m) = \frac{d\tau_{an}^{(i)}}{dt} = -\xi_2 \tau_{an}^{(i)} \left(\gamma^{(i)} / \sum_{j=1}^K \gamma^{(j)} \right) \dot{\gamma}^{(i)} (\gamma^{(i+12)} + \gamma_0^a), \quad (2.2.13)$$

$$\tau_{an}^{(i)} \Big|_{t=0} = \tau_{c0}^{(i)}, \quad i = \overline{1, K},$$

где γ_0^a , ξ_2 – материальные параметры, $\tau_{an}^{(i)}$ – уменьшение критических напряжений за счет аннигиляции дислокаций.

Важным фактором, определяющим упрочнение, является сопротивление границ кристаллитов, точнее – полей дефектов в них, движению внутризеренных дислокаций. В начальном приближении для описания этой составляющей – зернограничного упрочнения – можно принять простую модель с учетом образования в границах дислокаций ориентационного несоответствия (ДОН) [145]:

$$f_{згв}^{(i)}(\gamma^{(i)}, \dot{\gamma}^{(i)}, \xi) = \eta \gamma^{(i)} \dot{\gamma}^{(i)} \sum_{k=1}^P \frac{S_k}{V_0} \xi_{ik}, \quad (2.2.14)$$

где S_k – площадь участка границы кристаллита, «приходящаяся» на данную СС, V_0 – объем кристаллита, P – количество плоских участков (фасеток), аппроксимирующих границы кристаллита, мера разориентации ξ_{jk} определяется по минимальному значению для рассматриваемой СС данного кристаллита j , плоского участка границы k и всех СС l соседнего кристаллита: $\xi_{jk} = \min_{l=1, K} \{ \mathbf{n}^{(k)} \cdot (\mathbf{b}^{(l)} - \mathbf{b}^{(j)}) \}$, где $\mathbf{n}^{(k)}$ – нормаль к плоскому участку границы, η – параметр, определяемый при идентификации модели.

Развитие моделей упрочнения осуществляется путем более детального описания механизмов взаимодействия дефектной структуры, что является предметом работы многих научных коллективов. Например, в [46, 48, 49] предложен явный учет в соотношениях для эволюции критических напряжений отдельного вклада от механизма зернограничного упрочнения.

Межкристаллитная граница является эффективным препятствием для скользящих дислокаций, барьерное действие границы обусловлено резким изменением ориентаций СС при переходе через нее [85]. В общем случае, если дислокация текущего кристаллита перешла в соседний кристаллит со своим

вектором Бюргерса, то этот вектор был бы произвольно ориентирован относительно решетки соседнего кристаллита и движение такой дислокации вызывало бы сильное нарушение упаковки атомов. Вследствие этого примем следующий механизм движения дислокации через границу: решеточная дислокация (РД) рассматриваемого кристаллита переходит в энергетически более выгодную СС соседнего [48], оставляя в границе ДОН. Следующая РД, скользящая по той же СС кристаллита, будет испытывать дополнительное сопротивление за счет поля упругих напряжений ранее образовавшейся ДОН.

Для построения соотношений для описания упрочнения за счет границ кристаллитов последовательно решаются связанные задачи [49]:

– определение СС в соседнем кристаллите, по которой продолжится скольжение; при этом необходимо предложить некоторый критерий, согласно которому будет определяться указанная СС в соседнем кристаллите (решение задачи предложено в [48], где определение СС в соседнем кристаллите, в которую переходит дислокация, основывается на минимизации скорости приращения внутренней энергии соседних кристаллитов в текущий момент деформирования за счет несовместности сдвигов на границе);

– определение ДОН, остающейся в границе при акте прохождения дислокации через границу, и оценка напряжений, действующих на РД со стороны ДОН, скорость возрастания этих напряжений характеризует скорость изменения критического напряжения сдвига за счет сопротивления границ кристаллитов (решение задачи содержится в [49]).

Отметим, что при активизации зернограничного скольжения при описании зернограничного упрочнения следует учесть диссоциацию граничных дефектов за счет реализации ЗГС (соответствующая модификация соотношений приводится в главе 6).

Для описания деформирования при значительных температурах в записанном в общем виде законе упрочнения (2.2.10) необходимо учесть и другие механизмы взаимодействия элементов дефектной структуры, в частности – приводящих к разупрочнению.

Как правило, в процессах ТМО металлов и сплавов наряду с упрочнением происходит и разупрочнение материала, в частности – возврат, который осуществляется за счет перестройки дефектной структуры (движения, перераспределения и аннигиляции дислокаций и точечных дефектов [63, 154]), ведущей к снижению внутренней энергии, а следовательно, и внутренних напряжений микро- и атомарного уровня. Очевидно, что реализация таких механизмов зависит от температуры и скорости деформации, что должно быть учтено в уравнениях для упрочнения.

В [305] подробно описывается макрофеноменологический подход для учета распада части сплетений (образований дислокационной структуры) за счет действующих напряжений. Поскольку рассматриваются умеренные температуры (ниже $0.6 T_{пл}$), влиянием диффузии пренебрегается. Стоит заметить, что в [305] не приводятся результаты применения предлагаемой модели, она лишь характеризуется авторами как имеющая перспективы при описании сложного нагружения. Представляется, что для последнего все-таки целесообразней применять многоуровневые модели ФТП, в частности – поскольку макрофеноменологические модели в подавляющем большинстве случаев устанавливаются для одноосных нагружений, для оценки их применимости для описания произвольных нагружений требуется отдельное рассмотрение перехода к трехмерному случаю.

В ФТП при использовании закона упрочнения в виде (2.2.10) эффекты, связанные с возвратом, обычно учитываются в основном слагаемом, описывающим упрочнение за счет взаимодействия дефектов, однако возможно и более детальное рассмотрение с выделением в законе для изменения критических напряжений сдвигов (2.2.10) разупрочняющей составляющей за счет возврата [46], при этом, поскольку процесс возврата реализуется преимущественно диффузионным путем, т.е. является термически активируемым, в соотношения входит параметр диффузии (энергия активации диффузии точечных дефектов).

Динамический возврат – не единственный механизм разупрочнения, наблюдаемый при высокотемпературном деформировании. Существенное влияние на неупругое поведение материала оказывает динамическая рекристаллизация,

которая в отличие от возврата приводит к практически полному восстановлению механических и физических свойств до значений недеформированного материала. Этот процесс протекает достаточно быстро в отличие от процесса возврата и тем быстрее, чем выше температура [154]. Следует отметить, что построение корректной модели рекристаллизации — отдельная и весьма сложная проблема, находящаяся за рамками настоящей работы. Обычно при описании влияния рекристаллизации на упрочнение принимается ряд упрощающих гипотез (например, о том, что средний размер, форма, ориентации и упругие свойства кристаллитов при рекристаллизации не изменяются) и в (2.2.10) добавляется сформулированное с применением этих гипотез и физических соображений дополнительное разупрочняющее слагаемое [46].

Альтернативный вариант учета влияния температуры, скорости деформации и рекристаллизации приводится в главе 6 — введением слагаемого аррениусовского типа для учета диффузионных процессов, наделением скоростной чувствительностью коэффициента упрочнения в основном слагаемом и учетом формы зерен, меняющейся в процессе рекристаллизации, в том же коэффициенте упрочнения. Отметим, что в главе 6 описывается также формулировка закона изменения критических напряжений для механизма зернограничного скольжения.

Перспективой развития многоуровневых моделей является формулировка законов упрочнения с учетом нижних масштабных уровней — с явным рассмотрением плотностей дислокаций по СС, движения отдельных дислокаций (в том числе — с применением методов дислокационной и молекулярной динамики) и их взаимодействия с барьерами различной природы (п.1.3). К термически преодолимым относятся барьер Пайерлса (сопротивление атомов решетки), сопротивление от дислокаций леса, барьеры скольжению (барьеры Ломера — Коттрелла, Хирта и др). К термически непреодолимым барьерам относятся большеугловые границы зёрен, границы двойников и включений вторичных фаз. Преодоление данных барьеров затруднено, но возможно при приложении больших касательных напряжений. Выход дислокаций на границу зерна или двойника может привести к испусканию дислокаций в соседней

области. Приведенные факторы, также как и процессы аннигиляции дислокаций, работы источников, различных вариантов взаимодействий дислокаций (например, с образованием барьеров Ломера – Коттрелла) могут моделироваться явным образом – путем введения в структуру модели соответствующих внутренних переменных (плотностей дислокаций на СС, плотностей барьеров различных типов) и эволюционных уравнений для них (п.1.3).

Как отмечено выше, формулировка соотношений для упрочнения не входила в основные задачи работы. При моделировании неупругого деформирования при низких гомологических температурах в основном использовалось соотношение (2.2.9), для мелкозернистого материала дополнительно учитывалось зернограничное упрочнение (использовались соотношения из [48, 49]). При повышенных температурах применялись эти же эволюционные уравнения, усовершенствованные указанным выше образом – с учетом влияния на возврат температуры и скорости деформации, рекристаллизации, действия зернограничного скольжения, подробно описанные в главе 6.

3. Подход к формулировке кинематических и определяющих соотношений с учетом симметричных свойств мезоуровня

В п.3.1 рассматриваются некоторые нерешенные проблемы построения геометрически нелинейных моделей МДТТ, сделан акцент на вопросе формулировки определяющих соотношений при изменении симметричных свойств материала на макромасштабном уровне, происходящем в результате текстурообразования при механической обработке поликристаллических металлов и сплавов. Предлагаемый подход к построению кинематических и скоростных определяющих соотношений для таких материалов при больших градиентах перемещений, основанный на использовании многоуровневого моделирования, описывается в п.3.2.

3.1. Построение геометрически нелинейных моделей механики деформируемого твердого тела: подходы и проблемы

При моделировании большинства технологических процессов ТМО металлов и сплавов гипотеза о малости градиентов перемещений является неприемлемой – экспериментально наблюдаются большие градиенты перемещений, поэтому необходима геометрически нелинейная постановка соответствующих краевых задач [52, 57, 103, 286]. Постановка содержит следующие группы уравнений: нелинейные кинематические соотношения, балансовые уравнения (сохранения массы, количества движения, момента количества движения, энергии), конститутивные соотношения и краевые (включая контактные) условия. Балансовые уравнения и краевые условия являются классическими, в то время как кинематические и конститутивные соотношения, используемые в постановках таких задач, могут существенно отличаться.

При формулировке задачи в терминах отсчетной конфигурации определенные сложности связаны с тем, что меры напряжений, скорости напряжений и деформаций не имеют ясного физического смысла, что затрудняет построение определяющих соотношений (ОС). При использовании 2-го тензора напряжений Пиола – Кирхгоффа уравнения равновесия (или движения) и силовые граничные

условия становятся нелинейными, также возникают сложности с реализацией контактных граничных условий. При этом симметричные упругие свойства материала обычно полагаются «вмороженными» в отсчетную конфигурацию, что не позволяет корректно описать изменение симметрии, например, при формировании текстур при значительных неупругих деформациях.

В связи с вышесказанным предпочтительными представляются постановки краевой задачи в терминах актуальной (или разгруженной) конфигурации, причем в скоростной форме, удобной для применения численных методов: в этом случае возможно пошаговое решение с переопределением конфигурации расчетной области (в том числе – контактирующих поверхностей). Преимуществом формулировок ОС в этой форме является также возможность аддитивного разложения скорости неупругой деформации на вклады от различных механизмов (в частности, это использовано в главе 6 при формулировке модели с учетом механизма зернограничного скольжения). Далее ограничимся постановками только указанного типа.

Одним из основных соотношений в нелинейных конститутивных моделях для описания поведения материалов является упругий закон, формулируемый также в разных формах (конечной или скоростной) и в терминах различных конфигураций, поэтому ниже упругие соотношения рассматриваются более подробно. Обычно геометрически линейные упругие соотношения (соотношения при малых градиентах перемещений) в скоростной форме

$$\dot{\Sigma} = \mathbf{P} : \mathbf{D}^e \quad (3.1.1)$$

обобщаются на случай больших градиентов перемещений путем замены материальной производной тензора напряжений на независящую от выбора системы отсчета (коротационную или конвективную) производную:

$$\Sigma^{cr} = \mathbf{P} : \mathbf{D}^e. \quad (3.1.2)$$

В соотношениях (3.1.1), (3.1.2) Σ – индифферентная мера напряжений, определенная в текущей конфигурации, $\dot{\Sigma}$ – ее материальная производная по времени, \mathbf{P} – тензор упругих свойств материала, \mathbf{D}^e – упругая составляющая тензора деформации скорости, $(\cdot)^{cr}$ – независящая от выбора системы отсчета

производная, $\Sigma^{cr} = d\Sigma / dt + \Omega^T \cdot \Sigma + \Sigma \cdot \Omega$. Независящая от выбора системы отсчета производная тензорзначного параметра характеризует скорость его изменения, фиксируемую наблюдателем в некоторой подвижной системе координат (ПСК) [52, 57, 103 и др.], скорость изменения расположения которой в пространстве характеризуется тензором Ω . Соотношения типа (3.1.2) означают использование справедливых (верифицированных) для геометрически линейного приближения соотношений типа (3.1.1) наблюдателем, который связан с ПСК. Иными словами, осуществляется разложение движения на квазитвердое (движение ПСК) и собственно деформационное (воспринимаемое наблюдателем в ПСК и используемое при формулировке ОС).

Изотропный материал

Для упруго-изотропного материала при любом выборе объективной производной обеспечивается выполнение принципа независимости ОС от выбора системы отсчета [124], однако использование различных производных в ОС приводит к отличным друг от друга результатам, что отмечено во многих работах [103].

При использовании деформируемых ПСК (например, лагранжевой) возникает дополнительная сложность в установлении физического смысла получаемой конвективной производной: изменения компонент тензорной характеристики, обусловленные воздействиями (например, приложенными нагрузками), трудно отделить от их изменения за счет деформирования базиса [146], поэтому конвективные производные из рассмотрения исключены, $(\cdot)^{cr}$ далее обозначает коротационную производную, тензор Ω – антисимметричный, $\Sigma^{cr} = d\Sigma / dt - \Omega \cdot \Sigma + \Sigma \cdot \Omega$, ПСК – жесткая.

Среди коротационных производных традиционно наиболее популярными до недавнего времени были производная Зарембы – Яуманна [289, 458] и производная Грина–Нагхди [265]. Однако при использовании этих производных в ОС возникает проблема диссипации энергии при чисто упругом деформировании [306, 409]. Применение производной Зарембы – Яуманна приводит также к

физически необоснованному эффекту осцилляции компонент тензора напряжений при монотонном нагружении простым сдвигом [237, 325, 359].

Краткая историческая справка о различных формулировках гипопругих ОС приведена в [383, 384]. Отмечается, что в случае больших перемещений возникает необходимость формулировки упругого закона в скоростях, при этом появляется «проблема консервативности» ОС, т.е. появления диссипации энергии и незамкнутости траектории напряжений при нагружении по замкнутым циклам упругих деформаций (отметим, что для гиперупругих соотношений этой проблемы легко избежать использованием энергетически сопряженных мер напряжений и деформаций [2, 52, 188, 333, 353, 399 и др.]). В цитируемых работах подробно рассматриваются вопросы корректного определения скоростей напряжений, интегрируемости по Коши и по Грину гипопругих ОС. Следует отметить, что вопросам связи гипо- и гиперупругих соотношений, необходимости выполнения «условия консервативности» скоростных ОС упругопластичности посвящено большое число работ в области нелинейной МДТТ [137, 202, 215, 243, 378, 379, 404, 408 и др.].

Существенное развитие решения проблемы формулировки геометрически нелинейных гипопругих ОС для изотропного материала предложено авторами работ [446–452] – Н. Xiao, О.Т. Bruhns, А. Meyers. Ими был сформулирован критерий адекватности скоростных упругих (гипопругих) ОС: после деформирования из естественной конфигурации упругого материала по любым замкнутым траекториям деформации напряжения должны быть нулевыми (в дополнение к условию отсутствия диссипации энергии; для краткости будем называть их условиями консервативности упругих ОС).

Можно показать [137, 452], что данные критерии будут выполняться при существовании эквивалентного упругого определяющего соотношения в конечной форме (гиперупругого) с использованием сопряженных мер напряжений и деформаций. Последнее требование для изотропных упругих материалов сводится [452] к требованию существования голономной меры деформации \mathbf{M} , коротационная производная от которой \mathbf{M}^{cr} есть тензор деформации скорости \mathbf{D} : $\mathbf{M}^{cr} = d\mathbf{M} / dt - \boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{M} + \mathbf{M} \cdot \boldsymbol{\Omega} = \mathbf{D}$. В работах [446–452] показано, что

единственным решением данной задачи при условии, что \mathbf{M} должна быть именно голономной мерой деформации, т.е. определяться через градиент вектора перемещений (при этом для любого момента, когда $\mathbf{F} = \mathbf{I}$, должно выполняться $\mathbf{M} = \mathbf{0}$, \mathbf{I} – единичный тензор, \mathbf{F} – градиент деформации), является принятие в качестве меры деформации правой меры Генки $\mathbf{M} = \mathbf{H}$. Определяемый при этом спин назван авторами цитируемых работ логарифмическим (соответствующая коротационная производная – логарифмической):

$$\boldsymbol{\Omega}^{\log} = \mathbf{W} + \sum_{i \neq j}^m \left(\frac{1 + (b_i / b_j)}{1 - (b_i / b_j)} + \frac{2}{\ln(b_i / b_j)} \right) \mathbf{V}_i \cdot \mathbf{D} \cdot \mathbf{V}_j, \quad (3.1.3)$$

где b_1, \dots, b_m – собственные числа меры Фингера $\mathbf{V} = \mathbf{F} \cdot \mathbf{F}^T$, $\mathbf{V}_1, \dots, \mathbf{V}_m$ – соответствующие собственные проекции \mathbf{V} . В связи с тем, что для предложенной модели выполняются вышеприведенные условия отсутствия гистерезиса напряжений и диссипации энергии, она названа авторами self-consistent Eulerian model [452]. Стоит отметить, что в [219] указано, что одновременно несколько групп ученых искало представление \mathbf{D} как объективной скорости меры деформации: П.А. Жилин в 1995, отталкиваясь от другой идеи, пришел к выводу, сопоставимому с представлением $d\mathbf{H} / dt - \boldsymbol{\Omega}^{\log} \cdot \mathbf{M} + \mathbf{M} \cdot \boldsymbol{\Omega}^{\log} = \mathbf{D}$, однако тогда его результат остался неопубликованным (примечание 19.3 в [464]); соответствующая математическая задача по определению связей меры деформации, спина и меры скорости деформации рассматривалась также в [379].

В работах [221, 447, 466] логарифмическая производная предлагается к использованию в ОС теории пластического течения для изотропного материала, при этом спин определяется по полному градиенту деформации \mathbf{F} согласно (3.1.3). В [427] и, затем, в [291] приведены примеры, иллюстрирующие, что при этом возможны сложности при моделировании многостадийных процессов деформирования, включающих разгрузку: если после проведения упругопластического деформирования и разгрузки реализовывать чисто упругое циклическое нагружение, то будет наблюдаться гистерезис напряжений. Стоит заметить, что гистерезис напряжений будет наблюдаться и при использовании других популярных коротационных производных.

В [188] было предложено при формулировке гипопругого закона при рассмотрении упругопластического деформирования использовать логарифмический «упругий» спин, приведены формальные соотношения для него (аналогичные выражению для полного спина с заменой соответствующих мер деформаций и скоростей на их упругие составляющие). Однако при этом авторы не приводят соображений о том, как определить входящую в выражение логарифмического «упругого» спина упругую составляющую тензора вихря \mathbf{W}^e . В системе же уравнений конститутивной модели используются ОС только для симметризованных упругих и пластических составляющих градиента скорости перемещений.

В работах [290, 291] предложено усовершенствование логарифмического спина, названное кинетическим логарифмическим спином, с использованием которого требования консервативности выполняются и при моделировании многостадийных процессов деформирования, включающих разгрузку, однако рассмотрение также ограничивается изотропным материалом.

Анизотропный материал

Для упомянутых коротационных производных ПСК никак не связана с симметричными свойствами (элементами) материала; стоит отметить, что преимущественно с их использованием моделируются изотропные материалы. Представляется, что для общего случая анизотропного материала тензоры свойств (в том числе упругих) должны быть определены (быть постоянными) в ПСК, связанной с материальными осями симметрии [146]. В этом случае для наблюдателя в фиксированной лабораторной системе координат (ЛСК) эти тензоры будут изменяться как индифферентные, что позволяет выполнить принцип независимости ОС от выбора системы отсчета (в отличие от случая, когда постулируется постоянство тензора свойств при формулировке линейного ОС в актуальной конфигурации – из необходимости удовлетворения этому принципу следует, что тензор свойств может быть только изотропным [124]).

Отметим, что с использованием указанного свойства в [221] предложен способ формулировки ОС анизотропных материалов в терминах актуальной

конфигурации путем преобразования соотношений из отсчетной конфигурации, которые полагаются известными. Переход предлагается осуществлять с использованием ортогональных тензоров, что приводит к тому, что группа равноправности материала в актуальной конфигурации такая же, как в отсчетной конфигурации. Сходный подход с трансляцией ОС из отсчетной или некоторой другой конфигурации, где они полагаются известными, предлагается в работах A.Bertram [203].

В работах А.А.Рогового [108–110, 381] детально описывается подход к формулировке ОС в скоростной форме в актуальной конфигурации при переходе с малыми деформациями от промежуточной конфигурации, в которой связь между напряжениями и деформациями полагается известной, в том числе – с учетом структурных изменений в материале (с сохранением симметричных свойств).

Поскольку изменение симметричных свойств материала в указанных подходах не учитывается (симметричные свойства полагаются «вмороженными» в лагранжев базис отсчетной конфигурации), это несколько ограничивает возможности применения предложенного подхода для описания поликристаллов, для которых на макроуровне характерно изменение симметричных свойств в результате текстурообразования [324, 439]. Формирование текстуры определяется главным образом взаимодействием эволюционирующих дефектов различной природы и размерности: дислокаций, дисклинаций, границ зерен, субзерен, фрагментов и т.д., задача определения изменения симметричных свойств представительного макрообъема только по испытываемым им деформациям на сегодняшний день представляется принципиально не имеющей решения (по крайней мере – в общем случае произвольных сложных нагружений). Кроме того, построение базовых соотношений (в отсчетной конфигурации) представляется достаточно сложным процессом при учете нескольких ведущих механизмов деформирования, в то время как при формулировке уравнений в актуальной конфигурации в скоростях просто применяется аддитивное разложение скорости деформации (п.3.2).

В континуальной теории больших упругопластических деформаций для описания анизотропных материалов широкое распространение получил также

предложенный Dafalias подход, основанный на концепции так называемого «пластического спина» [185, 186, 228, 231, 232, 432 и др.]. В цитируемых работах пластический спин используется для определения изменения ориентации жесткого триэдра осей симметрии материала, т.е. класс симметрии материала опять же полагается неизменным.

В работах [389–392] предложена континуальная теория упругопластичности, в которой с учетом требования связи ПСК с элементами симметрии материала в упругих соотношениях конститутивной модели учитываются искажения решетки (деформационная часть движения) за исключением вращения атомарной решетки (квазитвердое движение). В связи с тем, что предлагаемая в указанных работах модель является континуальной, не вполне ясно определение триады направлений и тензора «пластического спина» (определяющего мгновенную скорость ротации материального триэдра) для ПО на макроуровне: в частности, автор предлагает использовать «осредненную решетку атомов», положение векторов триэдра считается «в принципе измеримым» в каждый момент деформирования.

Как отмечено выше, для анизотропного материала тензоры свойств (в том числе упругих), используемые при формулировке в актуальной конфигурации, должны быть постоянными в ПСК, связанной с материальными осями симметрии [146]. Вероятно, первым мысль о необходимости определения коротационных производных с привязкой к симметричным элементам материала (директорам) высказал J. Mandel, однако в его работах не удалось найти конкретное соотношение для описания спина решетки кристаллита. В [339] при установлении упругопластических соотношений к спину директоров добавляется спин $\dot{\mathbf{R}}^e \cdot \mathbf{R}^{eT}$, где \mathbf{R}^e – ортогональный тензор, входящий в полярное разложение упругой составляющей градиента деформации \mathbf{F}^e , тем самым осуществляется переход к другой жесткой ПСК, не совпадающей с триэдром директоров, характеризующих симметричные свойства. При этом тензор упругих характеристик считается постоянным, что, по мнению автора, приводит к сложностям с трактовкой физического смысла ОС.

Резюмируя содержание п.3.1, можно сделать следующие выводы:

- предпочтительна формулировка конститутивной модели в актуальной конфигурации в скоростях с использованием коротационных производных;
- отсутствует физическое обоснование приемлемости применения вышеприведенных популярных коротационных производных для анизотропных материалов;
- существующие подходы к формулировке скоростных соотношений в актуальной конфигурации для анизотропных материалов либо представляют собой трансляцию ОС из отсчетной конфигурации (в этом случае остается вопрос обоснования формулировки последних), либо не принимают во внимание изменение структуры материала, в частности, текстурирование поликристаллических металлов и сплавов,
- для анизотропного материала тензоры свойств (в том числе упругих), используемые при формулировке в актуальной конфигурации, должны быть постоянными в ПСК, связанной с материальными осями симметрии.

В большинстве конструкционных материалов (композитах, моно- и поликристаллических металлах и сплавах) практически всегда имеются такие «естественные» материальные элементы, с которыми можно связать оси координат подвижной системы отсчета на соответствующем масштабном уровне. Разумеется, при этом возникает необходимость введения в рассмотрение структуры материала на различных масштабных уровнях и использования многоуровневых моделей.

3.2. Подход к построению кинематических и скоростных определяющих соотношений для поликристаллических металлов и сплавов при больших градиентах перемещений, основанный на использовании многоуровневого моделирования

Далее рассматривается вариант модели упруговязкопластичности (упругопластичности), с использованием которой предпринята попытка решения обозначенных выше проблем. Для большей прозрачности анализируемого здесь вопроса – разложения движения (выделения квазитвердого движения ПСК), – ограничимся двухуровневой моделью и случаем изотермического

деформирования при отсутствии фазовых переходов.

Обратимся сначала к соотношениям мезоуровня (уровня кристаллита), которые в дальнейшем будут использованы в двухуровневой модели для описания неупругого поведения поликристаллических материалов. В части кинематического описания модель примыкает к используемым в так называемых теориях микрополярной пластичности соотношениям для определения скорости деформации [180, 234, 249, 264, 346 и др.] (обширный обзор приведен в [181]). Однако в отличие от указанных теорий микрополярной пластичности предлагаемая модель основана на связи ПСК с реальными материальными элементами – кристаллографическими направлениями и плоскостями. Спин элемента мезоуровня (кристаллита) определяется как скорость ротации жесткой системы координат, связанной с кристаллической решеткой. При этом в отличие от классических континуальных моделей в рассматриваемых двухуровневых моделях для мезоуровня не осуществляется «стягивания в точку» (обычно используемое в континуальной механике для формулировки уравнений в дифференциальной форме), ПО мезоуровня является всегда конечным (хотя и малым по сравнению с представительным макрообъемом).

На макроуровне спин определяется из условий согласования ОС мезо- и макроуровня и равен осредненному спину элементов мезоуровня [431]. ПО макроуровня состоит из нескольких сотен (300-1000 и более) кристаллитов (зерен, субзерен), каждый кристаллит рассматривается как ПО мезоуровня. В отсчетной конфигурации ориентация подвижных систем отсчета кристаллитов определяется законом распределения ориентаций, подвижная система макроуровня считается совпадающей с ЛСК.

Примем, что при описании деформирования ПО мезоуровня (кристаллита), считая его материалом первого порядка [124], пластические деформации осуществляются сдвигом при движении краевых дислокаций, не изменяющим ориентации кристаллической решетки. В дальнейшем полагается, что подвижная ортогональная декартова система координат $Ox_1x_2x_3$ с базисом \mathbf{k}^i жестко привязана к одному кристаллографическому направлению и кристаллографической плоскости, содержащей это направление [146]. Для вспомогательных рассуждений

вводится также специальная лагранжева система координат $Oy^1y^2y^3$ с базисом \mathbf{b}_i , которая в течение всего процесса деформирования связана с кристаллографической системой координат (КСК), от обычной лагранжевой системы координат данная отличается тем, что не учитывает пластические деформации, в процессе пластической деформации материал течет сквозь ПСК, оставляя последнюю недеформированной. Такое представление обосновано тем, что пластические деформации за счет внутрикристаллитного движения краевых дислокаций (принимаемых в качестве основных «носителей» неупругого деформирования) не изменяют ориентацию решетки, а следовательно – и симметричные упругие свойства материала, поэтому не оказывают влияния на движение жесткой ПСК. Следует заметить, что при рассмотрении пластических деформаций введение лагранжевой системы координат на микроуровне принципиально невозможно, поскольку для атомов при движении дислокаций не выполняется требование сохранения локальной близости («локальной топологии») [125], необходимой для введения лагранжевых координат. В то же время на более «грубых» масштабных уровнях (мезо- и макроуровень), в отличие от [28], считается приемлемым классическое определение лагранжевых координат и мер деформаций. В отсчетной конфигурации базис КСК выбирается ортонормированным, так что $\mathbf{b}_{i|t=0}$ ($i = \overline{1,3}$) – также ортонормированный триэдр; для упрощения рассмотрения, не теряя общности, можно принять, что ортонормированный базис кристаллографической системы координат совпадает с базисом подвижной системы координат в отсчетной конфигурации \mathbf{k}_0^i . Отметим также, что для металлов и сплавов (упругие) искажения КСК можно считать малыми, так что векторы базиса \mathbf{b}_i близки к векторам базиса \mathbf{k}^i .

Разложение градиента деформации и спин ПСК

Движение деформируемой среды представим последовательностью пластических деформаций (сохраняющих положение ПСК), поворота ПСК вместе с материалом и упругого искажения решетки относительно ПСК. В соответствии с таким представлением движения мультипликативное разложение

(транспонированного) градиента места мезоуровня имеет следующий вид [143]:

$$\mathbf{f} \equiv \overset{\circ}{\nabla} \mathbf{r}^T = \mathbf{f}^e \cdot \mathbf{f}^p = \bar{\mathbf{f}}^e \cdot \mathbf{r} \cdot \mathbf{f}^p. \quad (3.2.1)$$

Здесь $\overset{\circ}{\nabla}$ – набла оператор, определенный в отсчетной конфигурации; \mathbf{r} – радиус–вектор материальных частиц, зависит от накопленных сдвигов в отсчетной конфигурации; $\mathbf{r} = \mathbf{k}_i (\mathbf{k}^i|_{t=0}) \equiv \mathbf{k}_i \mathbf{k}_0^i$ – собственно ортогональный тензор, преобразующий отсчетный базис ПСК в текущий (тензор ротации ПСК из отсчетной в актуальную конфигурацию (вместе с материалом)); $\bar{\mathbf{f}}^e$ – градиент места, преобразующий пластически деформированную конфигурацию, испытавшую поворот, в актуальную конфигурацию (одновременно характеризующий однородное искажение решетки кристаллита). Для рассмотрения упругопластического деформирования требуется также введение дополнительной (разгруженной «решеточной») конфигурации $\overset{\times}{\mathbf{K}}$, которая в каждый момент деформирования определяется аффинным преобразованием $\bar{\mathbf{f}}^{e-1}$ актуальной (текущей) конфигурации \mathbf{K}_t (нетрудно видеть, что конфигурация $\overset{\times}{\mathbf{K}}$ совпадает с пластически деформированной конфигурацией, испытавшей поворот). Следует отметить, что при разгрузке ПСК остается фиксированной. Представление (3.2.1) – конкретизация классического разложения Кронера – Ли [313, 322, 323] путем явного выделения квазитвердого движения \mathbf{r} , при этом в общем случае тензор \mathbf{r} не совпадает с ортогональным тензором \mathbf{r}^e из полярного разложения \mathbf{f}^e (тензор $\bar{\mathbf{f}}^e$ – несимметричный).

Используем в качестве тензора, преобразующего индифферентные меры в инвариантные и обратно, тензор ротации \mathbf{r} , обладающий необходимыми свойствами [76]. Введем инвариантный аналог двухточечного тензора (транспонированного) градиента места:

$$\overset{\circ}{\mathbf{f}} = \mathbf{r}^T \cdot \mathbf{f} = \mathbf{r}^T \cdot \bar{\mathbf{f}}^e \cdot \mathbf{r} \cdot \mathbf{f}^p = \overset{\circ}{\mathbf{f}}^e \cdot \mathbf{f}^p, \quad (3.2.2)$$

где через $\overset{\circ}{\mathbf{f}}^e$ обозначен тензор упругих искажений, приведенный («повернутый») к базису отсчетной КСК (или ПСК в отсчетной конфигурации). Очевидно, что эта

мера является инвариантной по отношению к наложенному жесткому движению, равно как и ее материальная производная:

$$\begin{aligned}\overset{\circ}{\mathbf{f}} &= \dot{\mathbf{r}}^T \cdot \mathbf{f} + \mathbf{r}^T \cdot \dot{\mathbf{f}} = \dot{\mathbf{r}}^T \cdot \mathbf{r} \cdot \mathbf{r}^T \cdot \mathbf{f} + \mathbf{r}^T \cdot \left(\dot{\bar{\mathbf{f}}^e} \cdot \mathbf{r} \cdot \mathbf{f}^p + \bar{\mathbf{f}}^e \cdot \dot{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{f}^p + \bar{\mathbf{f}}^e \cdot \mathbf{r} \cdot \dot{\mathbf{f}}^p \right) = \\ &= \dot{\mathbf{r}}^T \cdot \mathbf{r} \cdot \overset{\circ}{\mathbf{f}} + \mathbf{r}^T \cdot \left(\dot{\bar{\mathbf{f}}^e} \cdot \mathbf{r} \cdot \mathbf{f}^p + \bar{\mathbf{f}}^e \cdot \dot{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{f}^p + \bar{\mathbf{f}}^e \cdot \mathbf{r} \cdot \dot{\mathbf{f}}^p \right).\end{aligned}$$

Преобразуя последнее соотношение, получим:

$$\overset{\circ}{\mathbf{f}} = \mathbf{r}^T \cdot \bar{\mathbf{f}}^{ecr} \cdot \mathbf{r} \cdot \mathbf{f}^p + \mathbf{r}^T \cdot \bar{\mathbf{f}}^e \cdot \mathbf{r} \cdot \dot{\mathbf{f}}^p, \quad (3.2.3)$$

где $\bar{\mathbf{f}}^{ecr} = \dot{\bar{\mathbf{f}}^e} + \bar{\mathbf{f}}^e \cdot \bar{\boldsymbol{\omega}} - \bar{\boldsymbol{\omega}} \cdot \bar{\mathbf{f}}^e$ – коротационная производная (со спином ПСК) упругой составляющей градиента места во введенном разложении, $\bar{\boldsymbol{\omega}} = \dot{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{r}^T$ – тензор спина ПСК; нетрудно проверить, что $\bar{\mathbf{f}}^{ecr}$ является индифферентной тензорзначной функцией.

Теперь от меры скорости деформаций (3.2.3) можно перейти к ее аналогу в актуальной конфигурации K_t , для чего слева умножим на \mathbf{r} , а справа – на \mathbf{r}^T . Соотношения между инвариантными (обозначаемые верхним индексом « \circ ») и индифферентными (верхний индекс « $\hat{}$ ») родственными мерами и их производными хорошо известны (см., например, [10, 449]), напомним их для рассматриваемых мер:

$$\hat{\mathbf{f}} = \mathbf{r} \cdot \overset{\circ}{\mathbf{f}} \cdot \mathbf{r}^T \Rightarrow \hat{\mathbf{f}}^{cr} = \mathbf{r} \cdot \overset{\circ}{\mathbf{f}} \cdot \mathbf{r}^T, \quad (3.2.4)$$

и наоборот – из правой части следует левая, что нетрудно проверить. Из (3.2.4) с использованием (3.2.3) получаем:

$$\hat{\mathbf{f}}^{cr} = \mathbf{r} \cdot \overset{\circ}{\mathbf{f}} \cdot \mathbf{r}^T = -\bar{\boldsymbol{\omega}} \cdot \bar{\mathbf{f}}^e \cdot \mathbf{r} \cdot \mathbf{f}^p \cdot \mathbf{r}^T + \left(\dot{\bar{\mathbf{f}}^e} \cdot \mathbf{r} \cdot \mathbf{f}^p + \bar{\mathbf{f}}^e \cdot \dot{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{f}^p + \bar{\mathbf{f}}^e \cdot \mathbf{r} \cdot \dot{\mathbf{f}}^p \right) \cdot \mathbf{r}^T. \quad (3.2.5)$$

Из приведенных соотношений сразу можно определить и индифферентную меру $\hat{\mathbf{f}}$ (в актуальной конфигурации K_t):

$$\hat{\mathbf{f}} = \mathbf{r} \cdot \overset{\circ}{\mathbf{f}} \cdot \mathbf{r}^T = \mathbf{f} \cdot \mathbf{r}^T = \bar{\mathbf{f}}^e \cdot \mathbf{r} \cdot \mathbf{f}^p \cdot \mathbf{r}^T = \bar{\mathbf{f}}^e \cdot \hat{\mathbf{f}}^p, \quad (3.2.6)$$

где введено обозначение: $\hat{\mathbf{f}}^p = \mathbf{r} \cdot \mathbf{f}^p \cdot \mathbf{r}^T$ (заметим, что $(\hat{\mathbf{f}}^p)^{-1} = \mathbf{r} \cdot (\mathbf{f}^p)^{-1} \cdot \mathbf{r}^T$). С использованием введенного обозначения соотношение (3.2.5) может быть преобразовано к виду:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{f}}^{cr} &= (\bar{\mathbf{f}}^{ecr} + \bar{\mathbf{f}}^e \cdot \mathbf{r} \cdot \dot{\mathbf{f}}^p \cdot \mathbf{r}^T \cdot \mathbf{r} \cdot \mathbf{f}^{p-1} \cdot \mathbf{r}^T) \cdot \hat{\mathbf{f}}^p = \\ &= (\bar{\mathbf{f}}^{ecr} + \bar{\mathbf{f}}^e \cdot \mathbf{r} \cdot \dot{\mathbf{f}}^p \cdot \mathbf{f}^{p-1} \cdot \mathbf{r}^T) \cdot \hat{\mathbf{f}}^p. \end{aligned} \quad (3.2.7)$$

В качестве упругой составляющей меры скорости деформации можно использовать коротационную производную упругой составляющей градиента места [143]:

$$\bar{\mathbf{f}}^{ecr} = (\hat{\mathbf{f}}^{cr} - \bar{\mathbf{f}}^e \cdot \mathbf{r} \cdot \dot{\mathbf{f}}^p \cdot \mathbf{r}^T) \cdot (\hat{\mathbf{f}}^p)^{-1}. \quad (3.2.8)$$

Связь полученной меры скорости деформаций с градиентом места и его производными определяется соотношением:

$$\hat{\mathbf{f}}^{cr} = \mathbf{r} \cdot \overset{\circ}{\mathbf{f}} \cdot \mathbf{r}^T = \mathbf{r} \cdot (\dot{\mathbf{r}}^T \cdot \mathbf{f} + \mathbf{r}^T \cdot \dot{\mathbf{f}}) \cdot \mathbf{r}^T = (\dot{\mathbf{f}} - \bar{\omega} \cdot \mathbf{f}) \cdot \mathbf{r}^T = \mathbf{f}^{cr} \cdot \mathbf{r}^T, \quad (3.2.9)$$

где \mathbf{f}^{cr} – коротационная производная двухточечного тензора (транспонированного градиента места). С учетом (3.2.9) и ранее введенного обозначения для $\hat{\mathbf{f}}^p$ соотношение (3.2.8) может быть преобразовано к виду:

$$\bar{\mathbf{f}}^{ecr} = \mathbf{f}^{cr} \cdot \mathbf{f}^{p-1} \cdot \mathbf{r}^T - \bar{\mathbf{f}}^e \cdot \mathbf{r} \cdot \dot{\mathbf{f}}^p \cdot \mathbf{f}^{p-1} \cdot \mathbf{r}^T. \quad (3.2.10)$$

Введем обозначения: $\mathbf{I}^p = \dot{\mathbf{f}}^p \cdot \mathbf{f}^{p-1}$, $\hat{\mathbf{I}}^p = \mathbf{r} \cdot \mathbf{I}^p \cdot \mathbf{r}^T$, с учетом которых соотношение (3.2.10) может быть записано в виде:

$$\bar{\mathbf{f}}^{ecr} = \mathbf{f}^{cr} \cdot \mathbf{f}^{p-1} \cdot \mathbf{r}^T - \bar{\mathbf{f}}^e \cdot \hat{\mathbf{I}}^p. \quad (3.2.11)$$

Отметим, что в отличие от других известных способов формулировки геометрически нелинейных ОС скоростного типа, основанных на использовании различных коротационных производных (Зарембы – Яуманна, Грина – Нагхди, логарифмической и других), предлагаемый подход дает возможность прозрачно описать ПСК, связанную с симметричными свойствами кристаллита, что позволяет описывать анизотропные упругие и пластические свойства при больших деформациях. В силу малых упругих искажений кристаллических решеток металлов и сплавов симметричные свойства кристаллитов неизменны в течение

всего процесса деформирования, компоненты тензора упругих характеристик в базисе жесткой ПСК можно считать постоянными. В случае трансформационного превращения кристаллита в другую фазу в силу известных ориентационных соотношений для кристаллита в новой фазовом состоянии несложно определить положение осей новой жесткой ПСК. Понятно, что в этом случае компоненты тензора упругих свойств могут измениться скачком, но они также могут считаться постоянными в новой жесткой системе координат.

Поскольку большинство кристаллических материалов способны испытывать только незначительные искажения решетки $\bar{\mathbf{f}}^e \approx \mathbf{I}$ (деформации в десятые и сотые доли процентов, \mathbf{I} – единичный тензор), ПСК $Ox^1x^2x^3$ с ортонормированным базисом \mathbf{k}_i представляется обоснованным связать с введенной выше лагранжевой системой координат $Oy^1y^2y^3$, связанной с кристаллографической [146]. Тензор спина ПСК на мезоуровне полностью определяется текущими ориентациями векторов базиса ПСК и упругой составляющей градиента скорости перемещений \mathbf{I}^e . Когда связь осуществляется привязкой к кристаллографическому направлению Oy^1 и плоскости Oy^1y^2 (оси Oy^1 и Ox^1 совпадают в каждый момент времени, ось Ox^2 в каждый момент деформирования располагается в плоскости Oy^1y^2 и ортогональна оси Ox^1), спин имеет вид [146]:

$$\begin{aligned} \bar{\omega}_{PI} = \dot{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{r}^T = \dot{\mathbf{k}}_i \mathbf{k}_i = & -(\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{I}^e \cdot \mathbf{k}_1) \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 - (\mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{I}^e \cdot \mathbf{k}_1) \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_3 + \\ & + (\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{I}^e \cdot \mathbf{k}_1) \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_1 - (\mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{I}^e \cdot \mathbf{k}_2) \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 + \\ & + (\mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{I}^e \cdot \mathbf{k}_1) \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_1 + (\mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{I}^e \cdot \mathbf{k}_2) \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_2. \end{aligned} \quad (3.2.12)$$

Отметим, что напряжения Коши получаются близкими при любой привязке к кристаллографическим направлениям и плоскостям [406] (результаты соответствующих численных расчетов приведены в п.5.1). В общем случае при принятии представления градиента деформации (3.2.1) для определения спина (закона изменения γ) могут быть использованы другие физически обоснованные модели ротации (например, основанные на рассмотрении взаимодействия дефектов соседствующих кристаллитов [145], с учетом вклада от механизма зернограничного скольжения – глава 6).

Определяющие соотношения в решеточной разгруженной конфигурации

С использованием полученных кинематических соотношений ОС формулируются в «решеточной» разгруженной конфигурации $\overset{\times}{\mathbf{K}}$ [143]:

$$\bar{\boldsymbol{\kappa}} = \bar{\mathbf{p}}_{(cr)} : \bar{\mathbf{c}}^e, \quad (3.2.13)$$

где $\bar{\mathbf{c}}^e = 1/2(\bar{\mathbf{f}}^{eT} \cdot \bar{\mathbf{f}}^e - \mathbf{I})$ – упругая составляющая правого тензора деформаций Коши–Грина, $\bar{\boldsymbol{\kappa}} = \overset{o}{\rho}/\hat{\rho} \bar{\mathbf{f}}^{e-1} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \bar{\mathbf{f}}^{e-T}$ – второй тензор Пиола – Кирхгоффа, $\bar{\mathbf{p}}_{(cr)}$ – тензор упругих характеристик (компоненты постоянны в базисе ПСК).

Как отмечено выше, для моделирования технологических процессов предпочтительной является постановка в скоростной форме в актуальной конфигурации. От (3.2.13) легко перейти [137] к эквивалентной скоростной форме:

$$\bar{\boldsymbol{\kappa}}^{cr} = \bar{\mathbf{p}}_{(cr)} : \bar{\mathbf{c}}^{ecr}, \quad (3.2.14)$$

где $\bar{\boldsymbol{\kappa}}^{cr}, \bar{\mathbf{c}}^{ecr}$ – коротационные производные 2-го тензора напряжений Пиола–Кирхгоффа и упругой составляющей тензора деформаций Коши–Грина. Важно отметить, что тензор $\bar{\mathbf{p}}_{(cr)}$ определен (его компоненты являются постоянными) в жесткой ПСК, что обеспечивает прозрачный смысл соотношения: подвижный наблюдатель по сути использует линейный закон, связывающий упругую составляющую скорости деформации и скорости напряжений.

В силу эквивалентности (3.2.13) и (3.2.14) энергетической сопряженности используемых мер вышеприведенные требования консервативности для модели (3.2.14) на произвольных замкнутых упругих циклах выполняются автоматически.

Рассмотрим для примера результаты применения предложенных соотношений при моделировании некоторых кинематических (жестких) нагружений упругих анизотропных металлов [143]. Отметим, что при любых способах привязки ПСК к материалу результаты (напряжения Коши, плотность внутренней энергии) получаются близкими к нижеприведенным, полученным при привязке к оси Oy^1 и плоскости Oy^1y^2 КСК (максимальное на всем интервале

времени отличие – норма разности соответствующих величин – составляет менее 0.001% по отношению к максимальному значению рассматриваемой величины).

При моделировании ГЦК-кристалла использовались упругие свойства (постоянные для наблюдателя в ПСК), соответствующие меди, независимые компоненты тензора свойств в ПСК: $\pi_{1111} = 168.4$ ГПа, $\pi_{1122} = 121.4$ ГПа, $\pi_{1212} = 75.4$ ГПа [172], для ГПУ-кристалла – упругие свойства, соответствующие TiO_2 , независимые компоненты тензора свойств в ПСК: $\pi_{1111} = 273$ ГПа, $\pi_{1122} = 176$ ГПа, $\pi_{1133} = 149$ ГПа, $\pi_{3333} = 484$ ГПа, $\pi_{1313} = 125$ ГПа, $\pi_{1212} = 194$ ГПа [172]. Начальные ориентации кристаллографической и ПСК совпадают и определяются путем последовательного поворота начально совмещенной с ЛСК системы координат для ГЦК-кристалла вокруг оси Ox^1 на угол $\phi_1 = 0.41$, вокруг оси Ox^2 на угол $\phi_2 = -0.66$, вокруг оси Ox^3 на угол $\phi_3 = 1.19$, для ГПУ-кристалла – вокруг оси Ox^1 на угол $\phi_1 = 0.43$, вокруг оси Ox^2 на угол $\phi_2 = 1.28$, вокруг оси Ox^3 на угол $\phi_3 = -0.755$ (углы поворота выбраны случайным образом).

Пример 1. Деформирование по циклу №1

Рассматривается однородное аффинное деформирование по замкнутому циклу кинематического нагружения прямоугольного в отсчетной конфигурации параллелепипеда с квадратом в поперечном сечении (с длиной стороны L), расположенным в плоскости OX_1X_2 фиксированной ЛСК; рассматриваемые варианты упругих свойств материала (тип решетки кристаллита и ее ориентация) описаны выше. Движение определено градиентом деформации:

$$\mathbf{F}(t) = \mathbf{I} + 3(t-1)^2 \frac{(1-\cos(\varphi))r_d/h}{1+\sin(\varphi)r_d/h} \mathbf{p}_1\mathbf{p}_2 + 3t(t-1)^2 (1-\cos(\varphi))\sin(\varphi) \frac{r_d}{h} \mathbf{p}_2\mathbf{p}_2,$$

где $\varphi = 2\pi t$, $r_d/h = 0.0005$ – постоянный параметр, \mathbf{p}_i – базис неподвижной ЛСК, деформирование рассматривается на интервале времени $t \in [0, 1]$. В силу однородности деформирования радиус-вектор материальной точки тела в произвольный момент времени t определяется согласно $\mathbf{r}(t) = \mathbf{F}(t) \cdot q^i \mathbf{p}_i$, где q^i –

лагранжевы координаты. Для иллюстрации на рис.3.2.1 приведена схема движения точки тела с лагранжевыми координатами $(0,L,0)$ м.

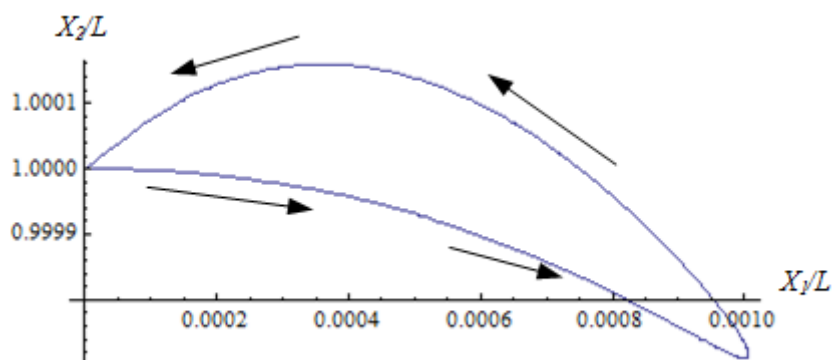


Рис. 3.2.1. Схема движения точки с лагранжевыми координатами $(0,L,0)$ м, в начальный и конечный момент деформирования положение точки соответствует $X_1/L=0, X_2/L=1, X_3=0$

При принятом разложении движения ПСК для каждого расчетного варианта в конечный момент времени приходит точно в свое начальное положение.

На рис. 3.2.2 приведены зависимости от времени компонент в ЛСК тензора напряжений Коши для рассматриваемых ГЦК и ГПУ-кристаллитов.

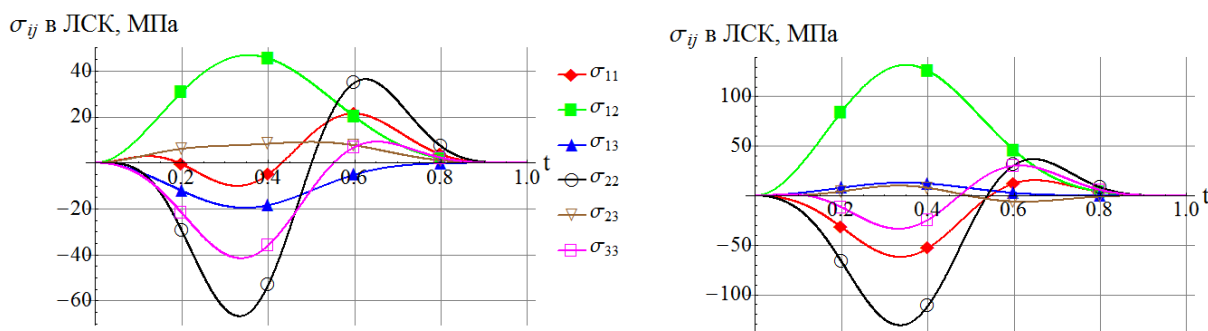


Рис. 3.2.2. Зависимость компонент тензора напряжений Коши в ЛСК от времени (слева – для ГЦК-кристаллита, справа – для ГПУ-кристаллита)

Следует отметить, что напряжения Коши получаются нулевыми в конце цикла, т.е. отсутствует гистерезис напряжений.

На рис.3.2.3 приведена зависимость плотности внутренней энергии от времени.

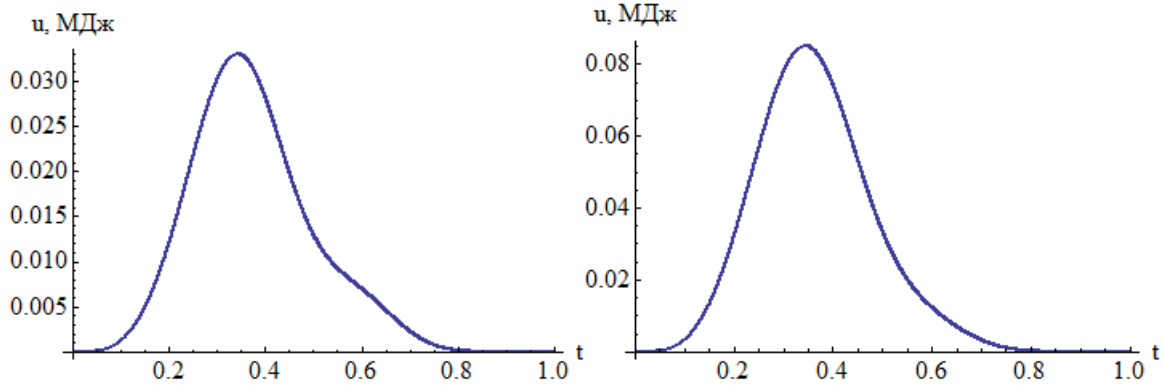


Рис. 3.2.3. Изменение плотности внутренней энергии со временем (слева – для ГЦК-кристаллита, справа – для ГПУ-кристаллита)

Результаты свидетельствуют об отсутствии диссипации энергии.

Пример 2. Деформирование по циклу №2

Рассматривается однородное деформирование по замкнутому циклу кинематического нагружения описанного выше тела с градиентом места:

$$\mathbf{F}(t) = \mathbf{I} + t^2 \frac{(1 - \cos(\varphi)) r_d / h}{1 + \sin(\varphi) r_d / h} \mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2 + t(t-1)^2 (1 - \cos(\varphi)) \sin(\varphi) \frac{r_d}{h} \mathbf{p}_2 \mathbf{p}_2,$$

где $\varphi = 2\pi t$, $r_d / h = 0.0005$ – постоянный параметр, \mathbf{p}_i – базис неподвижной ЛСК, деформирование рассматривается на интервале времени $t \in [0 c, 1 c]$. На рис.3.2.4 приведена схема движения точки тела с лагранжевыми координатами $(0, L, 0)$ м.

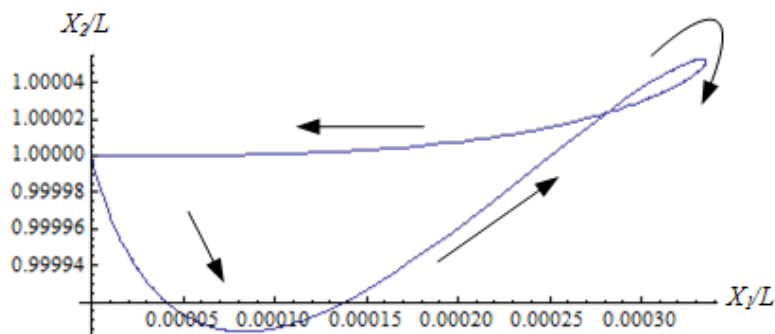


Рис.3.2.4. Схема движения точки с лагранжевыми координатами $(0, L, 0)$, в начальный и конечный момент деформирования положение точки соответствует

$$X_1/L=0, X_2/L=1, X_3=0$$

На рис. 3.2.5 приведены полученные зависимости от времени компонент в ЛСК тензора напряжений Коши, на рис.3.2.6 – изменение плотности внутренней энергии со временем.

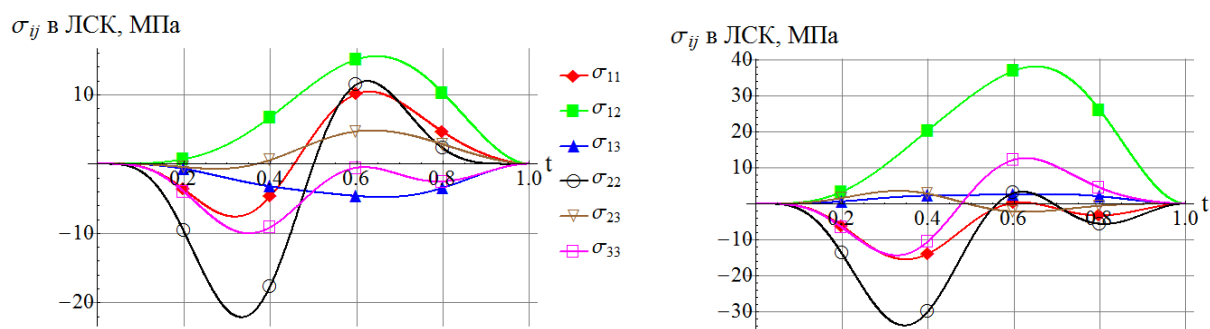


Рис. 3.2.5. Зависимость компонент тензора напряжений Коши в ЛСК от времени (слева – для ГЦК-кристаллита, справа – для ГПУ-кристаллита)

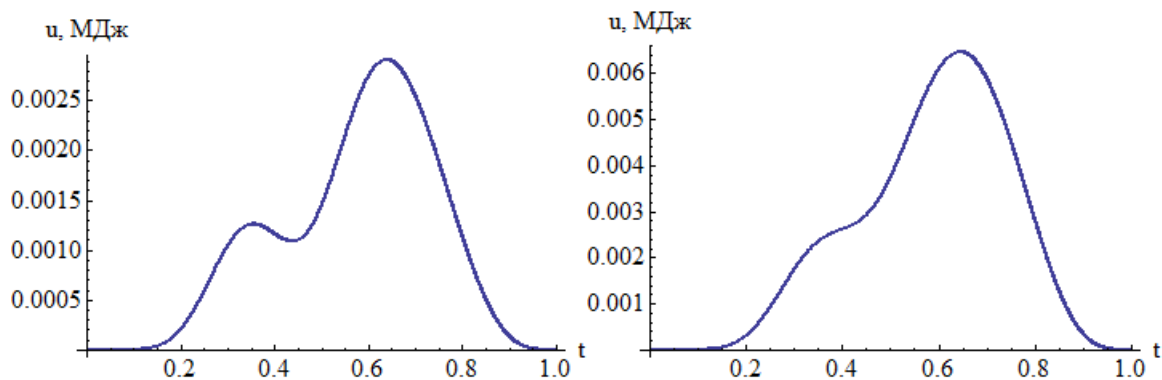


Рис. 3.2.6. Изменение плотности внутренней энергии со временем (слева – для ГЦК-кристаллита, справа – для ГПУ-кристаллита)

Полученные численные результаты (в т.ч. для приведенных примеров) подтверждают, что при любых упругих циклических деформированиях будет отсутствовать гистерезис напряжений и диссипация энергии. Отметим, что были проведены тестовые расчеты и при значительно больших циклических деформациях по различным циклам – во всех подтверждается вышеприведенный аналитический результат об отсутствии диссипации энергии на любых упругих циклах при использовании предложенных соотношений (эти результаты не приводятся по причине физической нереализуемости – для известных металлов невозможно достижение значительных чисто упругих деформаций).

Определяющие соотношения в текущей конфигурации

Обратимся к вопросу формулировки ОС в терминах актуальной конфигурации на основе предложенных соотношений.

При использовании мультипликативного представления градиента места (3.2.1) транспонированный градиент скорости перемещений $I = \hat{\nabla} \mathbf{v}^T$ представляется в виде:

$$\begin{aligned} I &= \dot{\mathbf{f}} \cdot \mathbf{f}^{-1} = \dot{\bar{\mathbf{f}}}^e \cdot \bar{\mathbf{f}}^{e-1} + \bar{\mathbf{f}}^e \cdot \dot{r} \cdot r^T \cdot \bar{\mathbf{f}}^{e-1} + \bar{\mathbf{f}}^e \cdot r \cdot \dot{\mathbf{f}}^p \cdot \mathbf{f}^{p-1} \cdot r^T \cdot \bar{\mathbf{f}}^{e-1} = \\ &= \dot{\bar{\mathbf{f}}}^e \cdot \bar{\mathbf{f}}^{e-1} + \bar{\mathbf{f}}^e \cdot \boldsymbol{\omega} \cdot \bar{\mathbf{f}}^{e-1} + \bar{\mathbf{f}}^e \cdot r \cdot \dot{\mathbf{f}}^p \cdot \mathbf{f}^{p-1} \cdot r^T \cdot \bar{\mathbf{f}}^{e-1} = \bar{I}^e + I^\omega + I^p. \end{aligned} \quad (3.2.15)$$

В представлении (3.2.15) $\bar{I}^e = \dot{\bar{\mathbf{f}}}^e \cdot \bar{\mathbf{f}}^{e-1}$ – скорость упругих искажений (решетки), $I^p = \bar{\mathbf{f}}^e \cdot r \cdot \dot{\mathbf{f}}^p \cdot \mathbf{f}^{p-1} \cdot r^T \cdot \bar{\mathbf{f}}^{e-1} = \mathbf{f}^e \cdot \dot{\mathbf{f}}^p \cdot \mathbf{f}^{p-1} \cdot \mathbf{f}^{eT}$ – мера скорости пластических деформаций в актуальной конфигурации, $I^\omega = \bar{\mathbf{f}}^e \cdot \boldsymbol{\omega} \cdot \bar{\mathbf{f}}^{e-1}$ – тензор спина квазитвердого вращения, преобразованный в базис актуальной «решеточной» конфигурации. Таким образом, мультипликативному представлению градиента деформации (3.2.1) соответствует аддитивное разложение градиента скорости перемещений (3.2.15), в котором отделены квазитвердая и собственно деформационные составляющие (I^ω и $\bar{I}^e + I^p$). Повторим, что при разгрузке из актуальной конфигурации K_t положение ПСК принимается фиксированным, соответствующим ее положению в момент t , определяемым ортогональным преобразованием $r(t)$, при этом конструктивно решается известный вопрос о неединственности определения разгруженной конфигурации (или – о неединственности тензора упругой ротации).

При условии малости упругих искажений $\bar{\mathbf{f}}^e \approx \mathbf{I}$ (где \mathbf{I} – единичный тензор второго ранга, при этом повороты ПСК могут быть большими), которое вполне приемлемо для металлов и сплавов в большинстве реальных процессов деформирования [115], разгруженная и актуальная конфигурации близки и для (3.2.15) справедлива оценка [427]:

$$I \approx \dot{\bar{\mathbf{f}}}^e \cdot \bar{\mathbf{f}}^{e-1} + \bar{\boldsymbol{\omega}} + r \cdot \dot{\mathbf{f}}^p \cdot \mathbf{f}^{p-1} \cdot r^T. \quad (3.2.16)$$

Дополнительно учитывая в выкладках термическую составляющую и обозначая $\mathbf{z}^{\text{in}} = \mathbf{r} \cdot \dot{\mathbf{f}}^{\text{p}} \cdot \mathbf{f}^{\text{p}-1} \cdot \mathbf{r}^{\text{T}}$, получаем, что скорость упругого искажения материала характеризуется тензором

$$\dot{\bar{\mathbf{f}}}^{\text{e}} \cdot \bar{\mathbf{f}}^{\text{e}-1} \approx \mathbf{I} - \boldsymbol{\omega} - \mathbf{z}^{\text{in}} - \mathbf{z}^{\text{th}}, \quad (3.2.17)$$

определенным в актуальной конфигурации. Очевидно, что в качестве меры скорости деформации в ОС предпочтительно использовать (3.2.17). Мера скорости полных деформаций при этом – транспонированный градиент относительной скорости перемещений, определяемый как $\hat{\nabla} \mathbf{v}_r^{\text{T}} = \mathbf{I} - \boldsymbol{\omega}$; в [138] показано, что эта мера скорости полных деформаций является индифферентной к наложенному жесткому движению.

Рассмотрим ОС (3.2.14) при условии $\bar{\mathbf{f}}^{\text{e}} \approx \mathbf{I}$, $\bar{\mathbf{f}}^{\text{e}} = \mathbf{I} + \bar{\mathbf{y}}$, $\bar{\mathbf{y}}$ – малый тензор (градиент перемещений), $\|\bar{\mathbf{y}}\| \ll \|\mathbf{I}\|$ [169].

В этом случае для тензора деформации Коши-Грина справедливо приближение:

$$\bar{\mathbf{c}}^{\text{e}} = \frac{1}{2} (\bar{\mathbf{f}}^{\text{eT}} \cdot \bar{\mathbf{f}}^{\text{e}} - \mathbf{I}) = \frac{1}{2} ((\mathbf{I} + \bar{\mathbf{y}})^{\text{T}} \cdot (\mathbf{I} + \bar{\mathbf{y}}) - \mathbf{I}) = \frac{1}{2} (\bar{\mathbf{y}} + \bar{\mathbf{y}}^{\text{T}} + \bar{\mathbf{y}}^{\text{T}} \cdot \bar{\mathbf{y}}) \approx \frac{1}{2} (\bar{\mathbf{y}} + \bar{\mathbf{y}}^{\text{T}}), \quad (3.2.18)$$

а для второго тензора напряжений Пиола – Кирхгоффа (с учетом $\overset{\circ}{\rho}/\hat{\rho} \approx 1$ и $\bar{\mathbf{f}}^{\text{e}-1} \approx \mathbf{I} - \bar{\mathbf{y}}$):

$$\bar{\mathbf{k}} = \overset{\circ}{\rho}/\hat{\rho} \bar{\mathbf{f}}^{\text{e}-1} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \bar{\mathbf{f}}^{\text{e}-\text{T}} \approx (\mathbf{I} - \bar{\mathbf{y}}) \cdot \mathbf{k} \cdot (\mathbf{I} - \bar{\mathbf{y}}^{\text{T}}) \approx \mathbf{k}, \quad (3.2.19)$$

где $\mathbf{k} = \overset{\circ}{\rho}/\hat{\rho} \boldsymbol{\sigma}$ – взвешенный тензор напряжений Кирхгоффа.

С учетом оценок (3.2.18) и (3.2.19) приближенно соотношение (3.2.14) можно записать (с учетом симметричности $\bar{\mathbf{p}}_{(cr)}$ по второй паре индексов) в виде:

$$\mathbf{k}^{\text{cr}} = \bar{\mathbf{p}}_{(cr)} : \frac{1}{2} (\bar{\mathbf{y}} + \bar{\mathbf{y}}^{\text{T}})^{\text{cr}} = \bar{\mathbf{p}}_{(cr)} : \bar{\mathbf{y}}^{\text{cr}}. \quad (3.2.20)$$

Воспользуемся выражением (3.2.8) для производной $\bar{\mathbf{f}}^{\text{e-cr}}$:

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{f}}^{\text{e-cr}} &= (\hat{\mathbf{f}}^{\text{cr}} - \bar{\mathbf{f}}^{\text{e}} \cdot \mathbf{r} \cdot \dot{\mathbf{f}}^{\text{p}} \cdot \mathbf{r}^{\text{T}}) \cdot (\hat{\mathbf{f}}^{\text{p}})^{-1}, \\ (\mathbf{I} + \bar{\mathbf{y}})^{\text{cr}} = \bar{\mathbf{y}}^{\text{cr}} &= (\hat{\mathbf{f}}^{\text{cr}} - \bar{\mathbf{f}}^{\text{e}} \cdot \mathbf{r} \cdot \dot{\mathbf{f}}^{\text{p}} \cdot \mathbf{r}^{\text{T}}) \cdot (\hat{\mathbf{f}}^{\text{p}})^{-1}, \end{aligned} \quad (3.2.21)$$

где $\hat{\mathbf{f}}^p = \mathbf{r} \cdot \mathbf{f}^p \cdot \mathbf{r}^T$, $(\hat{\mathbf{f}}^p)^{-1} = \mathbf{r} \cdot \mathbf{f}^{p-1} \cdot \mathbf{r}^T$, $\hat{\mathbf{f}}^{cr} = (\dot{\mathbf{f}} - \bar{\boldsymbol{\omega}} \cdot \mathbf{f}) \cdot \mathbf{r}^T$.

Соотношение (3.2.21) с учетом (3.2.9) представимо в виде:

$$\bar{\mathbf{y}}^{cr} = (\dot{\mathbf{f}} - \bar{\boldsymbol{\omega}} \cdot \mathbf{f}) \cdot \mathbf{f}^{p-1} \cdot \mathbf{r}^T - \bar{\mathbf{f}}^e \cdot \mathbf{r} \cdot \dot{\mathbf{f}}^p \cdot \mathbf{f}^{p-1} \cdot \mathbf{r}^T. \quad (3.2.22)$$

С учетом $\bar{\mathbf{f}}^e = \mathbf{f} \cdot \mathbf{f}^{p-1} \cdot \mathbf{r}^T$, $\mathbf{f}^{-1} \cdot \bar{\mathbf{f}}^e = \mathbf{f}^{p-1} \cdot \mathbf{r}^T$ соотношение (3.2.22) принимает вид:

$$\bar{\mathbf{y}}^{cr} = \dot{\mathbf{f}} \cdot \mathbf{f}^{-1} \cdot \bar{\mathbf{f}}^e - \bar{\boldsymbol{\omega}} \cdot \bar{\mathbf{f}}^e - \bar{\mathbf{f}}^e \cdot \mathbf{r} \cdot \dot{\mathbf{f}}^p \cdot \mathbf{f}^{p-1} \cdot \mathbf{r}^T. \quad (3.2.23)$$

Полагая упругие искажения малыми, $\bar{\mathbf{f}}^e \approx \mathbf{I}$, (3.2.23) можно приближенно записать как:

$$\bar{\mathbf{y}}^{cr} \approx \dot{\mathbf{f}} \cdot \mathbf{f}^{-1} - \bar{\boldsymbol{\omega}} - \mathbf{r} \cdot \dot{\mathbf{f}}^p \cdot \mathbf{f}^{p-1} \cdot \mathbf{r}^T. \quad (3.2.24)$$

С учетом обозначения $\mathbf{z}^{in} = \mathbf{r} \cdot \dot{\mathbf{f}}^p \cdot \mathbf{f}^{p-1} \cdot \mathbf{r}^T$ получаем, что

$$\bar{\mathbf{y}}^{cr} \approx \mathbf{I} - \bar{\boldsymbol{\omega}} - \mathbf{z}^{in}.$$

При учете скорости температурных деформаций получаем, что

$$\bar{\mathbf{y}}^{cr} = \dot{\bar{\mathbf{f}}}^e \cdot \bar{\mathbf{f}}^{e-1} \approx \mathbf{I} - \bar{\boldsymbol{\omega}} - \mathbf{z}^{in} - \mathbf{z}^{th}.$$

Таким образом, установлено, что упругое соотношение в терминах решеточной разгруженной конфигурации (3.2.14) (его можно назвать «строгим» из-за точного обеспечения выполнения условий консервативности) имеет приближенную формулировку при $\bar{\mathbf{f}}^e \approx \mathbf{I}$, характерном для металлов и сплавов [169]:

$$\mathbf{k}^{cr} = \mathbf{n} : (\mathbf{I} - \bar{\boldsymbol{\omega}} - \mathbf{z}^{in} - \mathbf{z}^{th}), \quad (3.2.25)$$

которая и используется в структуре базовой двухуровневой модели (п.2.1).

Численными расчетами подтверждено, что использование «приближенных» соотношений приводит к незначительному отличию получаемых напряжений [164, 169] (описание результатов расчетов приводится в главе 5). Для моделирования циклического упругого деформирования металлов и сплавов при эксплуатации можно использовать «строгое» соотношение (3.2.14). При описании технологических процессов интенсивного неупругого деформирования предпочтительно использовать соотношения в форме (3.2.25) – в связи с обозначенными выше преимуществами при решении краевых задач и формулировке расширенных моделей (в частности, возможность разложения

скорости неупругой деформации на составляющие от отдельных механизмов используется при создании модели сверхпластичности в главе 6). В этом случае соотношения макроуровня (для ПО поликристаллического материала) определяются из условий согласования ОС мезоуровня [431].

Отметим, что именно предложенная «строгая» формулировка (кинематические соотношения (3.2.1) и ОС (3.2.14)) позволяет обоснованно осуществить переход к «приближенной» скоростной формулировке в актуальной конфигурации (3.2.25); предлагаемые кинематические и ОС мезоуровня применимы при построении многоуровневых моделей различных типов.

Различные формы записи упругого закона, основанные на предложенном разложении движения, его альтернативные варианты, а также варианты соотношений для спина решетки рассматриваются и сопоставляются аналитически в п.4.1, результаты численного моделирования сравниваются в п.5.2.

4. Анализ двухуровневых моделей материалов и полные постановки задач исследования с их помощью поведения образцов и конструкций

В п.4.1 приведенные выше формулировки соотношений мезоуровня сопоставляются с известными моделями физических теорий пластичности (ФТП): рассмотрены разные формулировки упругих определяющих соотношений (ОС) и уравнений для спина подвижной системы координат (ПСК). В п.4.2 представлены полная постановка задачи моделирования поведения однородного деформируемого образца (ПО макроуровня) с использованием предложенной модели мезоуровня в скоростях в актуальной конфигурации и постановка краевой задачи для описания технологических процессов с использованием этой конститутивной модели материала.

4.1. Аналитическое сопоставление моделей мезоуровня с разными упругими соотношениями и с разным определением спинов

Последовательно запишем и проанализируем предложенные, а также некоторые известные формулировки упругих соотношений и уравнений для спина ПСК. Для сокращения объема изложения не рассматриваются термические деформации, однако нетрудно сделать соответствующие дополнения в выкладках.

Различные формулировки упругого закона в модели мезоуровня

Модель А

Рассмотрим сначала формулировку в терминах решеточной разгруженной конфигурации, определяемой $\bar{\mathbf{f}}^{e-1}$ в соответствии с введенным мультипликативным представлением (3.2.1) градиента деформации на мезоуровне $\mathbf{f} = \mathbf{f}^e \cdot \mathbf{f}^p = \bar{\mathbf{f}}^e \cdot \mathbf{r} \cdot \mathbf{f}^p$ [169].

ОС мезоуровня в терминах разгруженной решеточной конфигурации принимается в виде (3.2.13) [169]:

$$\bar{\mathcal{K}} = \bar{\mathbf{p}}_{(cr)} : \bar{\mathbf{c}}^e, \quad (4.1.1)$$

где используются определенные в этой конфигурации второй тензор Пиола – Кирхгоффа $\bar{\mathbf{k}} = \overset{\circ}{\rho} / \hat{\rho} \bar{\mathbf{f}}^{e-1} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \bar{\mathbf{f}}^{e-T}$, $\boldsymbol{\sigma}$ – тензор напряжений Коши, $\overset{\circ}{\rho}, \hat{\rho}$ – плотность в отсчетной и актуальной конфигурациях, $\bar{\mathbf{p}}_{(cr)}$ – тензор упругих характеристик (компоненты постоянны в базисе ПСК), $\bar{\mathbf{c}}^e$ – упругая составляющая правого тензора деформаций Коши–Грина ($\bar{\mathbf{c}}^e = 1/2(\bar{\mathbf{f}}^{eT} \cdot \bar{\mathbf{f}}^e - \mathbf{I})$).

Пластическая составляющая градиента деформации \mathbf{f}^p определяется из соотношения [169]:

$$\dot{\mathbf{f}}^p \cdot (\mathbf{f}^p)^{-1} = \sum_{k=1}^K \dot{\gamma}^{(k)} \overset{\circ}{\mathbf{b}}^{(k)} \overset{\circ}{\mathbf{n}}^{(k)}, \quad (4.1.2)$$

где $\overset{\circ}{\mathbf{b}}^{(k)}, \overset{\circ}{\mathbf{n}}^{(k)}$ – единичные векторы направления скольжения и нормали к плоскости скольжения в отсчетной конфигурации, K – число СС в кристаллите. Для установления скоростей сдвигов $\dot{\gamma}^{(k)}$ на СС во многих моделях используется либо вязкопластическое соотношение, либо упругопластическое соотношение (рассматриваются в п.2.2).

Совокупность соотношений (4.1.1), (4.1.2) и остальных уравнений мезоуровня – представление деформационного градиента (3.2.1), вязкопластических соотношений (2.2.8), определения сдвиговых напряжений (2.1.2)₅, уравнений для описания упрочнения (2.2.9), соотношений для определения спина ПСК (3.2.12) – обозначим как «*Модель А*».

Модель Б

В большинстве современных работ по ФТП [183, 281, 297, 385 и др.] (п.1.3) используются соотношения в «классической» разгруженной конфигурации – получаемой из актуальной аффинным преобразованием $(\mathbf{f}^e)^{-1}$:

$$\mathbf{k} = \mathbf{p}_0 : \mathbf{c}^e, \quad (4.1.3)$$

где $\mathbf{k} = \overset{\circ}{\rho} / \hat{\rho} \mathbf{f}^{e-1} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{f}^{e-T}$ – второй тензор Пиола–Кирхгоффа, $\mathbf{c}^e = 1/2((\mathbf{f}^e)^T \cdot \mathbf{f}^e - \mathbf{I})$ – мера деформации Коши–Грина, \mathbf{p}_0 – тензор упругих свойств в отсчетной конфигурации.

Если использовать мультипликативное представление градиента деформации (3.2.1), то соотношение (4.1.3) можно записать в виде [164]:

$$J \mathbf{r}^T \cdot (\bar{\mathbf{f}}^e)^{-1} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot (\bar{\mathbf{f}}^e)^{-T} \cdot \mathbf{r} = \bar{\Pi}^{ijmn} \mathbf{k}_{0i} \mathbf{k}_{0j} \mathbf{k}_{0m} \mathbf{k}_{0n} : 1/2 \left(\mathbf{r}^T \cdot (\bar{\mathbf{f}}^e)^T \cdot \bar{\mathbf{f}}^e \cdot \mathbf{r} - \mathbf{I} \right),$$

после преобразований имеем

$$J (\bar{\mathbf{f}}^e)^{-1} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot (\bar{\mathbf{f}}^e)^{-T} = \bar{\Pi}^{ijmn} (\mathbf{r} \cdot \mathbf{k}_{0i}) (\mathbf{r} \cdot \mathbf{k}_{0j}) (\mathbf{r} \cdot \mathbf{k}_{0m}) (\mathbf{r} \cdot \mathbf{k}_{0n}) : 1/2 \left((\bar{\mathbf{f}}^e)^T \cdot \bar{\mathbf{f}}^e - \mathbf{I} \right),$$

$$J (\bar{\mathbf{f}}^e)^{-1} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot (\bar{\mathbf{f}}^e)^{-T} = \bar{\Pi}^{ijmn} \mathbf{k}_i \mathbf{k}_j \mathbf{k}_m \mathbf{k}_n : 1/2 \left((\bar{\mathbf{f}}^e)^T \cdot \bar{\mathbf{f}}^e - \mathbf{I} \right),$$

последнее соотношение совпадает с (4.1.1) (в выкладках \mathbf{k}_i – базис ПСК, \mathbf{k}_{0i} – базис ПСК в начальный момент времени).

Таким образом, напряжения Коши, получаемые при использовании соотношений (4.1.1) и (4.1.3), совпадают (в п.5.2 приводятся подтверждающие это результаты численных расчетов).

Конститутивную модель мезоуровня, включающую соотношения (4.1.3), классическое представление градиента деформации $\mathbf{f} = \mathbf{f}^e \cdot \mathbf{f}^p$ (Крёнер, Ли), соотношения (4.1.2) для его пластической составляющей, вязкопластические соотношения (2.2.8), определения сдвиговых напряжений (2.1.2)₅, уравнения для упрочнения (2.2.9), соотношения для определения спина ПСК (3.2.12), обозначим как «*модель B*».

Стоит отметить, что несмотря на то, что при использовании одной и той же модели ротации решетки (например, со спином (3.2.12)) модели *A* и *B* будут давать одинаковые напряжения, важно обратить внимание на отличие при их построении: при формулировке модели *A* ключевым является введение разложения движения (3.2.1) с явным выделением ПСК, что позволяет физически прозрачным способом перейти к близкой (приближенной) формулировке в скоростной форме в актуальной конфигурации ($\mathbf{B}_{скор}$), которая приводится ниже и которая является более предпочтительной для постановки и численного решения краевых задач (с изменяющимися контактными условиями в технологических процессах ТМО).

Дополнительным преимуществом модели *A* является прозрачное определение разгруженной конфигурации элемента мезоуровня (кристаллита) – она

определяется однозначно снятием упругих искажений с $\bar{\mathbf{f}}^{e-1}$ с фиксацией положения ПСК в момент начала разгрузки [143]. При использовании модели **B** при разгрузке проявляется известная проблема неединственности определения разгруженной конфигурации – вообще говоря, она определяется с точностью до произвольного ортогонального тензора. Следует отметить, что классическое разложение градиента деформации $\mathbf{f} = \mathbf{f}^e \cdot \mathbf{f}^p$ оперирует только кинематическими характеристиками, оно никак не связано с кристаллической решеткой, а следовательно и с симметричными свойствами. Для устранения неоднозначности определения разгруженной конфигурации в этом случае требуется то или иное дополнительное соглашение, например, запрещение ротации выбранной тройки материальных волокон, расположенных вдоль главных осей меры \mathbf{V}^e .

Модель $A_{лин}$

В альтернативной формулировке для металлов и сплавов в силу малости упругих искажений $\bar{\mathbf{f}}^e \approx \mathbf{I}$ можно использовать линейаризованные соотношения (с позиций наблюдателя в разгруженной с $\bar{\mathbf{f}}^{e-1}$ конфигурации, принимая близость этой конфигурации к актуальной):

$$\mathbf{J}\boldsymbol{\sigma} = \bar{\mathbf{n}} : (\bar{\mathbf{f}}^e + (\bar{\mathbf{f}}^e)^T - 2\mathbf{I})/2. \quad (4.1.4)$$

Конститутивную модель мезоуровня, математическая формулировка которой включает соотношения (4.1.4), (3.2.1), (4.1.2), (2.2.8), (2.1.2)₅, (2.2.9), (3.2.12), обозначим как «*модель $A_{лин}$* ».

Модель $A_{скор}$

При использовании представления движения (3.2.1) естественным образом осуществляется эквивалентная формулировка ОС в скоростной форме [143]: в базисе разгруженной кристаллографической системы координат (т.е. в базисе ПСК \mathbf{k}_i) компоненты тензора упругих свойств $\bar{\mathbf{n}}$ полагаются постоянными, с учетом последнего в базисе ПСК можно перейти [137] к эквивалентной скоростной форме соотношения (4.1.1): $\dot{\bar{k}}_{ij} = \bar{n}_{ijmn} \dot{\bar{c}}^{enm}$ (компоненты – в ПСК). С учетом физического смысла коротационной производной с позиций неподвижного наблюдателя в

лабораторной системе отсчета последнее соотношение принимает вид (3.2.14) [143]:

$$\bar{\mathbf{k}}^{\text{cr}} = \bar{\mathbf{p}}_{(cr)} : \bar{\mathbf{c}}^{\text{ecr}}, \quad (4.1.5)$$

где $\bar{\mathbf{k}}^{\text{cr}} = \dot{\bar{\mathbf{k}}} + \bar{\mathbf{k}} \cdot \bar{\boldsymbol{\omega}} - \bar{\boldsymbol{\omega}} \cdot \bar{\mathbf{k}}$, $\bar{\mathbf{c}}^{\text{ecr}} = \dot{\bar{\mathbf{c}}}^e + \bar{\mathbf{c}}^e \cdot \bar{\boldsymbol{\omega}} - \bar{\boldsymbol{\omega}} \cdot \bar{\mathbf{c}}^e$ – коротационные производные 2-го тензора напряжений Пиолы–Кирхгоффа и упругой составляющей тензора деформаций Коши–Грина соответственно. Обозначим совокупность соотношений (4.1.5), (4.1.2), (3.2.1), (2.2.8), (2.1.2)₅, (2.2.9), (3.2.12) как «модель $A_{\text{скор}}$ ».

Модель $B_{\text{скор}}$

В п.3.2 показано, что для металлов и сплавов при малых упругих искажениях $\bar{\mathbf{f}}^e \approx \mathbf{I}$ модель $A_{\text{скор}}$ дает близкие результаты к скоростной формулировке в актуальной конфигурации [169]:

$$\mathbf{k}^{\text{cr}} \equiv \dot{\mathbf{k}} + \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\omega} - \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{k} = \mathbf{p} : (\hat{\nabla} \mathbf{v}^T - \boldsymbol{\omega} - \mathbf{z}^{\text{in}} - \mathbf{z}^{\text{th}}), \quad (4.1.6)$$

где $\mathbf{k} = \overset{\circ}{\rho} / \hat{\rho} \boldsymbol{\sigma}$ – взвешенный тензор напряжений Кирхгоффа, $\mathbf{k}^{\text{cr}} = d\mathbf{k} / dt + \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\omega} - \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{k}$ – его коротационная производная. При этой формулировке неупругие деформации за счет ВДС определяются как [169]

$$\mathbf{z}^{\text{in}} = \sum_{k=1}^K \dot{\gamma}^{(k)} \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)}, \quad (4.1.7)$$

где $\dot{\gamma}^{(k)}$, $\mathbf{b}^{(k)}$, $\mathbf{n}^{(k)}$ – скорость сдвига, направление сдвига и нормаль к плоскости сдвига в актуальной конфигурации для k -й системы внутризеренного скольжения краевых дислокаций. Можно заметить, что единичные векторы направления скольжения и нормали к плоскости скольжения из отсчетной в текущую конфигурацию преобразуются с помощью собственно ортогонального тензора \mathbf{r} .

Обозначим совокупность соотношений (4.1.6), (4.1.7), (2.2.8), (2.1.2)₅, (2.2.9), (3.2.12) как «модель $B_{\text{скор}}$ ».

Таким образом, приведенные аналитические выкладки свидетельствуют о совпадении напряжений при использовании одинаковых соотношений для спинов и скоростей сдвигов для моделей A , B , $A_{\text{скор}}$, о близости этих напряжений к определяемым в моделях $A_{\text{лин}}$, $B_{\text{скор}}$. Этот вывод был подтвержден результатами

многочисленных численных экспериментов, результаты некоторых из них приводятся в п.5.2 для иллюстрации.

Различное определение спина в модели мезоуровня

Вне зависимости от способа описания внутризеренного неупругого деформирования за счет скольжения дислокаций (п.2.2), для описания поворота решетки зерна в подавляющем большинстве существующих работ используется либо модель стесненного поворота Тейлора [416], либо модель, связывающая поворот решетки с материальным поворотом, определяемым ортогональным тензором, сопровождающим упругую деформацию [281]. При этом приведенные в литературе результаты моделирования одинаковых процессов деформирования, в частности – распределение ориентаций решеток зерен в ПО, – при использовании обеих моделей оказываются весьма близкими. Подчеркнем, что, когда в современных работах используются соотношения (4.1.3) (модели **B**) без введения ПСК (п.1.3), моделирование текстурообразования в них осуществляется отдельно и не влияет на определение напряжений.

Спин T

Согласно модели (стесненного поворота) Тейлора в современной интерпретации [439] транспонированный градиент скорости перемещений на мезоуровне (уровне зерна) I представляется в виде:

$$I = (\hat{\nabla} \mathbf{v})^T = \bar{\omega} + \sum_{i=1}^K \dot{\gamma}^i \mathbf{b}^i \mathbf{n}^i, \quad (4.1.8)$$

откуда получается соотношение для спина решетки (антисимметричного тензора, обозначим спин по Тейлору как «спин T »):

$$\bar{\omega}_T = \frac{1}{2} ((\hat{\nabla} \mathbf{v})^T - \hat{\nabla} \mathbf{v}) + \sum_{i=1}^K \frac{1}{2} \dot{\gamma}^i (\mathbf{n}^i \mathbf{b}^i - \mathbf{b}^i \mathbf{n}^i). \quad (4.1.9)$$

Изначально модель Тейлора применялась для жесткопластических моделей (это следует из симметризованного соотношения (4.1.8) – вся деформация связывается со сдвигами по СС). В силу того, что в рамках этой гипотезы

материал полагается «стесненным» (деформации зерен ограничены соседями), модель Тейлора часто называют «полностью стесненной».

Проведем анализ (4.1.9) для жесткопластической модели [166]. При отсутствии скольжения дислокаций деформирование отсутствует, вращение решетки зерна согласно (4.1.9) описывается тензором вихря – зерно вращается как жесткое тело, что соответствует представлению движения согласно теореме Коши–Гельмгольца [103].

Рассмотрим простой сдвиг в направлении \mathbf{k}_1 ($\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3$ – базисные векторы декартовой ортогональной системы координат) с лагранжевым законом движения:

$$\mathbf{r} = (\xi^1 + at \xi^2) \mathbf{k}_1 + \xi^2 \mathbf{k}_2 + \xi^3 \mathbf{k}_3, \quad a = const, \quad (4.1.10)$$

где \mathbf{r} – радиус-вектор в актуальной конфигурации, ξ^i – лагранжевы координаты.

Градиент деформации для движения (4.1.10) определяется соотношением:

$$\mathbf{f} = \left(\overset{\circ}{\nabla} \mathbf{r} \right)^T = \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_1 + at \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_3, \quad (4.1.11)$$

где $\overset{\circ}{\nabla}$ – оператор Гамильтона, определенный в отсчетной конфигурации.

Транспонированный градиент скорости перемещений, определенный в актуальной конфигурации, тензоры вихря и деформации скорости имеют вид:

$$(\hat{\nabla} \mathbf{v})^T = \mathbf{l} = \dot{\mathbf{f}} \cdot \mathbf{f}^{-1} = a \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2, \quad (4.1.12)$$

$$\mathbf{w} = \frac{1}{2}(\mathbf{l} - \mathbf{l}^T) = \frac{a}{2}(\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_1), \quad \mathbf{d} = \frac{1}{2}(\mathbf{l}^T + \mathbf{l}) = \frac{a}{2}(\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_1). \quad (4.1.13)$$

Пусть скольжение осуществляется по единственной СС \mathbf{b}, \mathbf{n} , тогда согласно жесткопластической модели $\mathbf{l} = \dot{\gamma} \mathbf{bn}$. Если кристалл ориентирован так, что $\mathbf{b} = \mathbf{k}_1, \mathbf{n} = \mathbf{k}_2$, то имеем:

$$\mathbf{d} = \frac{\dot{\gamma}}{2}(\mathbf{bn} + \mathbf{nb}) = \frac{\dot{\gamma}}{2}(\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_1) = \frac{a}{2}(\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_1),$$

откуда $\dot{\gamma} = a$. Тогда, согласно (4.1.9), (4.1.13), спин решетки равен:

$$\bar{\omega}_T = \mathbf{w} + \frac{\dot{\gamma}}{2}(\mathbf{nb} - \mathbf{bn}) = \frac{a}{2}(\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_1) + \frac{a}{2}(\mathbf{k}_2 \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2) = \mathbf{0}. \quad (4.1.14)$$

Следовательно, если кристалл идеально ориентирован для сдвига по одной СС, то поворот решетки отсутствует, несмотря на формоизменение зерна.

Таким образом, согласно модели стесненного поворота Тейлора соотношение (4.1.9) определяет поворот решетки зерна как разность между вихрем и антисимметричной частью тензора пластических сдвигов.

Спин Re

Другим популярным для описания поворотов решетки является следующий подход [281]: для описания кинематики используется мультипликативное разложение Крёнера – Ли [313, 322, 323] градиента деформации ($\mathbf{f} = \mathbf{f}^e \cdot \mathbf{f}^p$), поворот решетки связывается с материальным поворотом, который определяется ортогональным тензором \mathbf{r}^e , сопровождающим упругую деформацию (входящим в полярное разложение упругого градиента деформации $\mathbf{f}^e = \mathbf{r}^e \cdot \mathbf{u}^e = \mathbf{v}^e \cdot \mathbf{r}^e$, $\mathbf{u}^e, \mathbf{v}^e$ – симметричные тензоры). Согласно модели «материального поворота» спин решетки (обозначим как «спин Re ») определяется как

$$\bar{\omega}_{Re} = \dot{\mathbf{r}}^e \cdot \mathbf{r}^{eT}. \quad (4.1.15)$$

В [281 Horstemeyer e.a. 2005] получено следующее соотношение для данного спина:

$$\begin{aligned} \bar{\omega}_{Re} &= \frac{1}{2}((\hat{\nabla} \mathbf{v})^T - \hat{\nabla} \mathbf{v}) + \sum_{i=1}^K \frac{1}{2} \dot{\gamma}^i (\mathbf{n}^i \mathbf{b}^i - \mathbf{b}^i \mathbf{n}^i) - (\mathbf{B} : \boldsymbol{\sigma}) \cdot \mathbf{d}^p + \mathbf{d}^p \cdot (\mathbf{B} : \boldsymbol{\sigma}) = \\ &= \bar{\omega}_T - (\mathbf{B} : \boldsymbol{\sigma}) \cdot \mathbf{d}^p + \mathbf{d}^p \cdot (\mathbf{B} : \boldsymbol{\sigma}), \end{aligned} \quad (4.1.16)$$

где $\mathbf{B} = (\mathbf{r}^e \cdot \bar{\mathbf{n}} \cdot (\mathbf{r}^e)^T)^{-1}$ – тензор четвертого ранга упругой податливости,

$\mathbf{d}^p = \sum_{i=1}^K \frac{1}{2} \dot{\gamma}^i (\mathbf{b}^i \mathbf{n}^i + \mathbf{n}^i \mathbf{b}^i)$. Из этого соотношения следует, что в силу малости

упругих деформаций ($\mathbf{B} : \boldsymbol{\sigma}$) использование в модели мезоуровня спина T и спина Re будет давать незначительно отличающиеся результаты; в п.5.2 приведены подтверждающие это результаты численных экспериментов. В [166] показана справедливость связи (4.1.16) между спинами T и Re .

Отметим, что, несмотря на название, модель «материального поворота» не подразумевает привязку к материалу (например, к элементам его симметрии).

Спин PI

В п.3.2 приведено описание подхода к описанию представления движения и формулировке геометрически нелинейных ОС, основанного на учете элементов симметрии материала. Напомним, что наряду с кристаллографической системой координат (КСК) $Oy^1y^2y^3$ с базисом \mathbf{q}_i вводится [146] жесткая ПСК $Op^1p^2p^3$ с ортонормированным базисом \mathbf{k}_i , в естественной отсчетной конфигурации совпадающая с КСК и связанная с ней в течение всего процесса деформирования. Связь осуществляется следующим образом: оси Oy^1 и Op^1 принимаются совпадающими в каждый момент времени (вектор \mathbf{k}_1 направлен вдоль вектора \mathbf{q}_1); вектор \mathbf{k}_2 в каждый момент деформирования располагается в плоскости Oy^1y^2 . В этом случае получаем соотношение (3.2.12) для определения спина [143]:

$$\begin{aligned} \bar{\omega}_{PI} = \dot{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{r}^T = \dot{\mathbf{k}}_i \mathbf{k}_i = & -(\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{l}^e \cdot \mathbf{k}_1) \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 - (\mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{l}^e \cdot \mathbf{k}_1) \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_3 + \\ & + (\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{l}^e \cdot \mathbf{k}_1) \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_1 - (\mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{l}^e \cdot \mathbf{k}_2) \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 + \\ & + (\mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{l}^e \cdot \mathbf{k}_1) \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_1 + (\mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{l}^e \cdot \mathbf{k}_2) \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_2. \end{aligned} \quad (4.1.17)$$

где $\mathbf{l}^e = \dot{\mathbf{f}}^e \cdot \mathbf{f}^{e-1}$ – упругая составляющая градиента скорости перемещений \mathbf{l} . Обозначим (4.1.17) как «спин PI ». Соотношение (4.1.17) согласуется с принятой независимостью положения ПСК и КСК от пластических деформаций за счет движения краевых дислокаций по СС. Важно отметить, что в рассматриваемых моделях можно использовать любую физически обоснованную модель для квазитвердого [103] движения ПСК, например, на основе рассмотрении взаимодействия дислокаций соседних зерен [115, 145], т.е. не ограничивать рассмотрение только кинематическими моделями (типа спинов \mathbf{T} , \mathbf{Re}); в главе 6 приводится пример дополнения соотношения для спина мезоуровня в случае активности зернограничного скольжения.

Можно показать, что напряжения Коши в модели A практически не зависят от способа привязки к элементам материальной симметрии для металлов и сплавов, для которых упругие искажения малы, отличием можно пренебречь [406].

Пусть при одинаковых кинематических воздействиях \mathbf{f} текущие положения ПСК при различных привязках к осям симметрии решетки описываются разными тензорами \mathbf{r} и \mathbf{r}^* (из-за малости упругих искажений эти тензоры близки), тогда

градиент деформации в рассматриваемых случаях имеет представление

$$\mathbf{f} = \mathbf{r} \cdot \bar{\mathbf{f}}^e \cdot \mathbf{f}^p = \mathbf{r} * \bar{\mathbf{f}}^e * \mathbf{f}^p * . \quad \text{Поскольку} \quad \dot{\mathbf{f}}^p \cdot \mathbf{f}^{p-1} = \sum_{k=1}^K \dot{\gamma}^{(k)} \mathbf{o}^{(k)} \mathbf{o}^{(k)} ,$$

$\dot{\gamma}^{(k)} = \dot{\gamma}_0 \left(\tau^{(k)} / \tau_c^{(k)} \right)^m H(\tau^{(k)} - \tau_c^{(k)})$, то отличие между \mathbf{f}^p и $\mathbf{f}^p *$ может быть порождено отличием определения касательных напряжений $\tau^{(k)} = J \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{n}^{(k)} \mathbf{b}^{(k)}$. Для металлов и сплавов, поскольку упругие искажения малы, тензоры \mathbf{r} и \mathbf{r}^* близки, поэтому близки и $\mathbf{n}^{(k)*} \approx \mathbf{n}^{(k)}$, $\mathbf{b}^{(k)*} \approx \mathbf{b}^{(k)}$. Принимая в обоих случаях начальные напряжения одинаковыми (нулевыми), можно заключить, что в начале пластического деформирования $\mathbf{f}^p \approx \mathbf{f}^p *$, откуда следует $\bar{\mathbf{f}}^e \approx \bar{\mathbf{f}}^e *$, в силу изохоричности пластических деформаций $J = \det \bar{\mathbf{f}}^e = \det \mathbf{f} = J^* = \det \bar{\mathbf{f}}^e *$.

Тогда имеем для рассматриваемых случаев

$$J \bar{\mathbf{f}}^{e-1} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \bar{\mathbf{f}}^{e-T} = \bar{\mathbf{n}} : 1/2 \left(\bar{\mathbf{f}}^{eT} \cdot \bar{\mathbf{f}}^e - \mathbf{I} \right),$$

где $\bar{\mathbf{n}} = \bar{\pi}^{ijmn} \mathbf{k}_i \mathbf{k}_j \mathbf{k}_m \mathbf{k}_n = \bar{\pi}^{ijmn} (\mathbf{r} \cdot \mathbf{k}_{0i}) (\mathbf{k}_{0j} \cdot \mathbf{r}^T) (\mathbf{r} \cdot \mathbf{k}_{0m}) (\mathbf{k}_{0n} \cdot \mathbf{r}^T)$,

$$J \bar{\mathbf{f}}^{e-1} * \boldsymbol{\sigma} * \bar{\mathbf{f}}^{e-T*} = \bar{\mathbf{n}}^* : 1/2 \left(\bar{\mathbf{f}}^{eT*} \cdot \bar{\mathbf{f}}^e * - \mathbf{I} * \right),$$

где $\bar{\mathbf{n}}^* = \bar{\pi}^{ijmn} \mathbf{k}_i * \mathbf{k}_j * \mathbf{k}_m * \mathbf{k}_n * = \bar{\pi}^{ijmn} (\mathbf{r} * \cdot \mathbf{k}_{0i}) (\mathbf{k}_{0j} \cdot \mathbf{r}^{T*}) (\mathbf{r} * \cdot \mathbf{k}_{0m}) (\mathbf{k}_{0n} \cdot \mathbf{r}^{T*})$.

Согласно ОС модели A (4.1.1) в случае определения положения ПСК с использованием тензора \mathbf{r} напряжения Коши устанавливаются следующим образом:

$$\boldsymbol{\sigma} = 1/J \bar{\mathbf{f}}^e \cdot \left(\bar{\mathbf{n}} : 1/2 \left(\bar{\mathbf{f}}^{eT} \cdot \bar{\mathbf{f}}^e - \mathbf{I} \right) \right) \cdot \bar{\mathbf{f}}^{eT} ,$$

где $\bar{\mathbf{n}} = \bar{\pi}^{ijmn} \mathbf{k}_i \mathbf{k}_j \mathbf{k}_m \mathbf{k}_n = \bar{\pi}^{ijmn} (\mathbf{r} \cdot \mathbf{k}_{0i}) (\mathbf{k}_{0j} \cdot \mathbf{r}^T) (\mathbf{r} \cdot \mathbf{k}_{0m}) (\mathbf{k}_{0n} \cdot \mathbf{r}^T)$,

$$\boldsymbol{\sigma} = 1/J \bar{\mathbf{f}}^e \cdot \mathbf{r}^T \cdot \left(\bar{\pi}^{ijmn} (\mathbf{r} \cdot \mathbf{k}_{0i}) (\mathbf{k}_{0j} \cdot \mathbf{r}^T) (\mathbf{r} \cdot \mathbf{k}_{0m}) (\mathbf{k}_{0n} \cdot \mathbf{r}^T) : 1/2 \left(\mathbf{r} \cdot \bar{\mathbf{f}}^{eT} \cdot \bar{\mathbf{f}}^e \cdot \mathbf{r}^T - \mathbf{I} \right) \right) \cdot \mathbf{r} \cdot \bar{\mathbf{f}}^{eT} ,$$

$$\boldsymbol{\sigma} = 1/J \bar{\mathbf{f}}^e \cdot \mathbf{r}^T \cdot \left(\bar{\pi}^{ijmn} (\mathbf{r} \cdot \mathbf{k}_{0i}) (\mathbf{k}_{0j} \cdot \mathbf{r}^T) (\mathbf{r}^T \cdot \mathbf{r} \cdot \mathbf{k}_{0m}) (\mathbf{k}_{0n} \cdot \mathbf{r}^T \cdot \mathbf{r}) : 1/2 \left(\mathbf{f}^{eT} \cdot \mathbf{f}^e - \mathbf{I} \right) \right) \cdot \mathbf{r} \cdot \mathbf{f}^{eT} ,$$

$$\boldsymbol{\sigma} = 1/J \bar{\mathbf{f}}^e \cdot \left(\bar{\pi}^{ijmn} (\mathbf{r}^T \cdot \mathbf{r} \cdot \mathbf{k}_{0i}) (\mathbf{k}_{0j} \cdot \mathbf{r}^T \cdot \mathbf{r}) (\mathbf{I} \cdot \mathbf{k}_{0m}) (\mathbf{k}_{0n} \cdot \mathbf{I}) : 1/2 \left(\mathbf{f}^{eT} \cdot \mathbf{f}^e - \mathbf{I} \right) \right) \cdot \mathbf{f}^{eT} ,$$

$$\boldsymbol{\sigma} = 1/J \bar{\mathbf{f}}^e \cdot \left(\bar{\pi}^{ijmn} \mathbf{k}_{0i} \mathbf{k}_{0j} \mathbf{k}_{0m} \mathbf{k}_{0n} : 1/2 \left(\mathbf{f}^{eT} \cdot \mathbf{f}^e - \mathbf{I} \right) \right) \cdot \mathbf{f}^{eT} . \quad (4.1.18)$$

В случае определения положения ПСК с использованием \mathbf{r}^* напряжения Коши устанавливаются соотношением:

$$\boldsymbol{\sigma}^* = 1/J^* \bar{\mathbf{f}}^e \cdot \left(\bar{\mathbf{p}}^* : 1/2 \left(\bar{\mathbf{f}}^{eT} \cdot \bar{\mathbf{f}}^e - \mathbf{I} \right) \right) \cdot \bar{\mathbf{f}}^{eT},$$

где $\bar{\mathbf{p}}^* = \bar{p}^{ijmn} \mathbf{k}_i \cdot \mathbf{k}_j \cdot \mathbf{k}_m \cdot \mathbf{k}_n = \bar{p}^{ijmn} (\mathbf{r}^* \cdot \mathbf{k}_{0i})(\mathbf{k}_{0j} \cdot \mathbf{r}^{T*})(\mathbf{r}^* \cdot \mathbf{k}_{0m})(\mathbf{k}_{0n} \cdot \mathbf{r}^{T*})$.

Аналогично вышеприведенному легко показать

$$\boldsymbol{\sigma}^* = 1/J^* \mathbf{f}^e \cdot \left(\bar{p}^{ijmn} \mathbf{k}_{0i} \mathbf{k}_{0j} \mathbf{k}_{0m} \mathbf{k}_{0n} : 1/2 \left(\mathbf{f}^{eT} \cdot \mathbf{f}^e - \mathbf{I} \right) \right) \cdot \mathbf{f}^{eT},$$

т.е. с учетом $J = J^*$, $\mathbf{f}^e \approx \mathbf{f}^{e*}$ напряжения Коши близки к определяемым в (4.1.18) при определении положения ПСК с использованием \mathbf{r} , некоторое незначительное отличие отклика при использовании различной привязки к элементам материальной симметрии возможно только за счет малого отклонения при определении касательных напряжений. Отметим, что при определении касательных напряжений в отсчетной конфигурации отличие исчезнет, однако в данном случае ускользает физический смысл этих переменных и эволюционных уравнений для описания упрочнения (формулировка эволюционных соотношений для внутренних переменных, в том числе для критических напряжений, существенно прозрачней в терминах актуальной конфигурации, поэтому и касательные напряжения лучше определять соответствующим образом).

Спин $P2$

Для иллюстрации в п.5.2 приводятся результаты и для двух других (случайно выбранных) вариантов привязки ПСК к симметричным свойствам решетки. Если оси Oy^2 и Op^2 принимаются совпадающими в каждый момент времени (вектор \mathbf{k}_2 направлен вдоль вектора \mathbf{q}_2), вектор \mathbf{k}_1 в каждый момент деформирования располагается в плоскости Oy^1y^2 , то спин («спин $P2$ ») определяется согласно:

$$\begin{aligned} \bar{\omega}_{P2} = \dot{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{r}^T = \dot{\mathbf{k}}_i \mathbf{k}_i = & (\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{l}^e \cdot \mathbf{k}_2) \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 - (\mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{l}^e \cdot \mathbf{k}_1) \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_3 + \\ & - (\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{l}^e \cdot \mathbf{k}_2) \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_1 - (\mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{l}^e \cdot \mathbf{k}_2) \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 + (\mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{l}^e \cdot \mathbf{k}_1) \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_1 + (\mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{l}^e \cdot \mathbf{k}_2) \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_2. \end{aligned}$$

Спин $P3$

Если оси Oy^3 и Op^3 принимаются совпадающими в каждый момент времени (вектор \mathbf{k}_3 направлен вдоль вектора \mathbf{q}_3), вектор \mathbf{k}_1 в каждый момент деформирования располагается в плоскости Oy^1y^3 , то соотношение для спина следующее («спин $P3$ »):

$$\begin{aligned} \bar{\omega}_{P3} = \dot{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{r}^T = \dot{\mathbf{k}}_i \mathbf{k}_i = & -(\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{l}^e \cdot \mathbf{k}_1) \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 + (\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{l}^e \cdot \mathbf{k}_3) \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_3 + \\ & + (\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{l}^e \cdot \mathbf{k}_1) \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_1 + (\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{l}^e \cdot \mathbf{k}_3) \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 - (\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{l}^e \cdot \mathbf{k}_3) \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_1 - (\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{l}^e \cdot \mathbf{k}_3) \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_2. \end{aligned} \quad (4.1.19)$$

Приведенные в этом разделе (и ранее – в 3.2) аналитические выкладки показывают эквивалентность или близость (в смысле определяемого отклика) результатов при использовании рассматриваемых упругих ОС и спинов решетки. Результаты численных расчетов, проведенных для произвольно выбранных кинематических нагружений поликристалла, приведенные в п.5.2, подтверждают данные аналитические выводы. Таким образом, можно заключить, что при моделировании технологических процессов ТМО могут использоваться все близкие формулировки конститутивных соотношений мезоуровня. Поскольку для таких процессов характерны изменяющиеся контактные условия, решение задачи предпочтительно осуществлять в скоростях в терминах актуальной конфигурации, поэтому в качестве основной формулировки рекомендуется к использованию модель мезоуровня с упругим соотношением в скоростной формулировке в текущей конфигурации ($\mathbf{B}_{\text{скор}}$) и спином, основанным на привязке к симметричным элементам мезоуровня (для определенности, $P1$); она входит в состав конкретизированной двухуровневой модели, представленной в п.4.2. Отметим, что скоростная формулировка в актуальной конфигурации удобней и для построения расширенной модели мезоуровня, включающей физические механизмы деформирования, не включенные в рассмотрение в настоящей работе (например, двойникование).

4.2. Полные постановки задач исследования поведения образцов и конструкций с помощью двухуровневых моделей материалов

Математическая постановка задачи описания неупругого деформирования представительного макрообъема материалов (однородного деформирования образца) с использованием двухуровневой модели при термомеханическом нагружении может быть сформулирована следующим образом.

Найти (в каждый момент времени): напряжения макроуровня $\Sigma(t)$, эффективные упругие свойства макроуровня $\mathbf{P}(t)$, мощность температурного источника $Q(t)$ (в некоторых случаях требуется найти также характеристики мезоуровня – для каждого кристаллита мезонапряжения, сдвиги по СС, ориентировку), удовлетворяющих следующей системе уравнений:

соотношениям макроуровня

ОС макроуровня

$$\mathbf{K}^{\text{cr}} \equiv \dot{\mathbf{K}} - \boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{K} + \mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\Omega} = \mathbf{P} : (\mathbf{L} - \boldsymbol{\Omega} - \mathbf{Z}^{\text{in}} - \mathbf{Z}^{\text{th}}),$$

связям переменных макроуровня с переменными мезоуровня (передача снизу вверх)

$$\mathbf{P} = \langle \mathbf{p}_{(i)} \rangle, i = 1, \dots, N,$$

$$\boldsymbol{\Omega} = \langle \boldsymbol{\omega}_{(i)} \rangle, i = 1, \dots, N,$$

$$\mathbf{Z}^{\text{in}} = \langle \mathbf{z}_{(i)}^{\text{in}} \rangle + \mathbf{P}^{-1} : \langle \mathbf{p}'_{(i)} : \mathbf{z}_{(i)}^{\text{in}'} \rangle + \mathbf{P}^{-1} : (\langle \mathbf{k}'_{(i)} \cdot \boldsymbol{\omega}'_{(i)} \rangle - \langle \boldsymbol{\omega}'_{(i)} \cdot \mathbf{k}'_{(i)} \rangle), i = 1, \dots, N,$$

$$\mathbf{Z}^{\text{th}} = \langle \mathbf{z}_{(i)}^{\text{th}} \rangle + \mathbf{P}^{-1} : \langle \mathbf{p}'_{(i)} : \mathbf{z}_{(i)}^{\text{th}'} \rangle, i = 1, \dots, N,$$

$$\Sigma = \langle \hat{\rho} / \rho \rangle \mathbf{K},$$

$$Q = \langle q_{(i)} \rangle, i = 1, \dots, N,$$

начальным условиям

$\mathbf{K}|_{t=0} = \mathbf{K}_0$, (аналогом последнего может быть начальное условие в терминах тензора напряжений Коши: $\Sigma|_{t=0} = \Sigma_0$),

соотношениям мезоуровня (для каждого кристаллита, $i = 1, \dots, N$)

ОС мезоуровня

$$\mathbf{k}^{\text{cr}} \equiv \dot{\mathbf{k}} + \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\omega} - \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{k} = \mathbf{n} : (\mathbf{I} - \boldsymbol{\omega} - \mathbf{z}^{\text{in}} - \mathbf{z}^{\text{th}}),$$

связям переменных макроуровня с переменными мезоуровня (передача сверху вниз)

$$\mathbf{I} = \hat{\nabla} \mathbf{v}^{\text{T}} = \hat{\nabla} \mathbf{V}^{\text{T}} = \mathbf{L}, \quad \theta = \Theta, \quad \dot{\theta} = \dot{\Theta},$$

эволюционным и замыкающим соотношениям

$$\mathbf{z}^{\text{in}} = \sum_{k=1}^K \dot{\gamma}^{(k)} \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)},$$

$$\dot{\gamma}^{(k)} = \dot{\gamma}_0 \left(\frac{\tau^{(k)}}{\tau_c^{(k)}} \right)^m \mathbf{H}(\tau^{(k)} - \tau_c^{(k)}), \quad k = 1, \dots, K,$$

$$\tau^{(k)} = \mathbf{k} : \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)}, \quad k = 1, \dots, K,$$

$$\dot{\tau}_c^{(k)} = \sum_{l=1}^K h^{(kl)} \dot{\gamma}^{(l)}, \quad h^{(kl)} = [q_{\text{lat}} + (1 - q_{\text{lat}}) \delta^{(kl)}] h^{(l)},$$

$$h^{(l)} = h_0 \left| 1 - \tau_c^{(l)} / \tau_{\text{sat}} \right|^a, \quad k = 1, \dots, K,$$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\omega} = \bar{\boldsymbol{\omega}}_{PI} = \dot{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{r}^{\text{T}} = \dot{\mathbf{k}}_i \mathbf{k}_i = & -(\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{l}^e \cdot \mathbf{k}_1) \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 - (\mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{l}^e \cdot \mathbf{k}_1) \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_3 + \\ & + (\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{l}^e \cdot \mathbf{k}_1) \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_1 - (\mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{l}^e \cdot \mathbf{k}_2) \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 + \\ & + (\mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{l}^e \cdot \mathbf{k}_1) \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_1 + (\mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{l}^e \cdot \mathbf{k}_2) \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_2, \quad \dot{\mathbf{o}} \cdot \mathbf{o}^{\text{T}} = \boldsymbol{\omega}, \end{aligned}$$

$$\mathbf{l}^e = \mathbf{I} - \mathbf{z}^{\text{in}} - \mathbf{z}^{\text{th}},$$

$$\mathbf{z}^{\text{th}} = \boldsymbol{\alpha} \dot{\theta},$$

$$\boldsymbol{\sigma} = \left(\hat{\rho} / \rho \right) \mathbf{k},$$

$$q = \alpha \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{z}^{\text{in}} / \hat{\rho},$$

начальным условиям

$$\mathbf{k} \Big|_{t=0} = \mathbf{k}_0, \quad \tau_c^{(k)} \Big|_{t=0} = \tau_{c0}^{(k)}, \quad \gamma^{(k)} \Big|_{t=0} = \gamma_0^{(k)}, \quad k = 1, \dots, K, \quad \mathbf{o} \Big|_{t=0} = \mathbf{o}_0,$$

при заданных воздействиях

$\hat{\nabla} \mathbf{V}^{\text{T}}(t)$ (кинематическом), $\Theta(t)$ (температурном).

При записи постановки использованы обозначения, введенные в главах 2 и 3:

на макроуровне

$\boldsymbol{\Sigma}$ — тензор напряжений Коши;

\mathbf{K} – взвешенный тензор напряжений Кирхгоффа, $\mathbf{K} = \left\langle \frac{\circ}{\rho/\hat{\rho}} \right\rangle \boldsymbol{\Sigma}$, где $\left\langle \frac{\circ}{\rho/\hat{\rho}} \right\rangle$ — среднее отношение плотности в отсчетной и текущей конфигурации для кристаллитов, составляющих ПО макроуровня (согласно обобщенной гипотезе Фойгта эта величина для всех кристаллитов одинакова); $\mathbf{K}^{cr} \equiv \dot{\mathbf{K}} - \boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{K} + \mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\Omega}$ – не зависящая от выбора системы отсчета скорость изменения (коротационная производная) тензора напряжений Кирхгоффа; \mathbf{K}_0 ($\boldsymbol{\Sigma}_0$) – начальное значение тензора макронапряжений Кирхгоффа (Коши), для естественной отсчетной конфигурации $\mathbf{K}_0 = \boldsymbol{\Sigma}_0 = \mathbf{0}$;

$\boldsymbol{\Omega}$ – тензор спина ПСК макроуровня;

\mathbf{P} – тензор эффективных упругих свойств (его компоненты постоянны в базисе ПСК макроуровня);

\mathbf{Z}^{in} , \mathbf{Z}^{th} – неупругая и термическая составляющие тензора скорости деформации;

Q – мощность источника (который необходимо использовать в уравнении теплопроводности краевой термомеханической задачи на уровне конструкции);

$\mathbf{L} = \hat{\nabla} \mathbf{V}^T$ – градиент скорости перемещений ($\hat{\nabla}$ – оператор Гамильтона в текущей лагранжевой системе координат, \mathbf{V} – вектор скорости перемещений);

Θ – температура;

на мезоуровне (индекс кристаллита опущен)

$\boldsymbol{\sigma}$ – тензор напряжений Коши;

$\mathbf{k} = \left(\frac{\circ}{\rho/\hat{\rho}} \right) \boldsymbol{\sigma}$ — взвешенный тензор напряжений Кирхгоффа;

$\mathbf{k}^{cr} \equiv \dot{\mathbf{k}} + \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\omega} - \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{k}$ – не зависящая от выбора системы отсчета скорость изменения (коротационная производная) тензора напряжений Кирхгоффа; \mathbf{k}_0 – начальное значение тензора мезонапряжений Кирхгоффа, для естественной конфигурации $\mathbf{k}_0 = \mathbf{0}$;

$\boldsymbol{\omega}$ – тензор спина ПСК кристаллита, определяющий скорость ее поворота;

\mathbf{o} – тензор ориентации ПСК; \mathbf{o}_0 – начальная ориентация ПСК;

\mathbf{p} – тензор упругих свойств кристаллита (его компоненты постоянны в базисе ПСК кристаллита);

\mathbf{z}^{in} и \mathbf{z}^{th} – неупругая и термическая составляющие скорости деформации мезоуровня;

$\mathbf{l} = \hat{\nabla} \mathbf{v}^T$ – транспонированный градиент скорости перемещений;

θ – температура;

$\gamma^{(k)}, \dot{\gamma}^{(k)}, \tau^{(k)}, \tau_c^{(k)}$ – накопленный сдвиг, скорость сдвига, действующее касательное и критическое касательное напряжение k -й СС; в отсчетной конфигурации полагается $\gamma_0^{(k)} = 0$;

$\mathbf{b}^{(k)}, \mathbf{n}^{(k)}$ – вектор направления и нормали к плоскости k -й СС;

q_{lat} принимает значение 1 для компланарных и значение 1.4 для некопланарных СС (с номерами k и l); $\delta^{(kl)}$ — дельта Кронекера;

$h_0, \tau_{\text{sat}}, a$ – параметры модели упрочнения;

\mathbf{l}^e – упругая составляющая транспонированного градиента скорости перемещений;

\mathbf{k}_i – базис ПСК;

\mathbf{a} – тензор термического расширения (его компоненты постоянны в базисе ПСК кристаллита);

q, α – мощность теплового источника и коэффициент выхода тепла.

Напомним, в п.4.1 показано (и подтверждено численными результатами в п.5.2), что при использовании в модели мезоуровня рассмотренных альтернативных упругих ОС и уравнений для спина получаются близкие результаты (в том числе напряжения макроуровня). Обоснование выбора принятой формулировки (п.3.2) основывается на учете симметричных свойств материала в геометрически нелинейных кинематических и определяющих соотношениях, а также предпочтительности скоростной формулировки в терминах актуальной конфигурации для применения при решении краевых задач с меняющимися граничными условиями (в том числе контактными), возникающими при исследовании большинства реальных технологических процессов ТМО.

Дополнительным преимуществом используемой формулировки является возможность наделения используемой меры деформации мезоуровня, получаемой коротационным интегрированием скорости деформации ($\mathbf{I} - \boldsymbol{\omega}$), прозрачным физическим смыслом (п.3.2) – в случае пренебрежения упругими искажениями она характеризует накопленные сдвиги по СС [147].

Выше для краткости записано простое соотношение для описания упрочнения (2.2.9). Вместо него может быть (и были) использованы более сложные модели, например, одна из приведенных в п.2.2, с расширением перечня внутренних переменных и уравнений для них, что предусмотрено в общей структуре многоуровневой конститутивной модели в (2.1.2):

$$\dot{\tau}_c^{(k)} = \left[\text{соотношения для } \dot{\tau}_c^{(k)}(\gamma^{(k)}, \dot{\gamma}^{(k)}, \mathbf{o}, \theta, \boldsymbol{\beta}_i) \right], k = 1, \dots, K, i = 1, \dots, I,$$

$$\dot{\boldsymbol{\beta}}_i = \left[\text{соотношения для } \dot{\boldsymbol{\beta}}_i(\mathbf{I}, \gamma^{(k)}, \dot{\gamma}^{(k)}, \mathbf{o}, \theta, \boldsymbol{\beta}_i) \right], i = 1, \dots, I,$$

где $\boldsymbol{\beta}_i$ – дополнительно введенные внутренние переменные. Аналогично при использовании расширенных моделей мезоуровня постановку легко дополнить соответствующими уравнениями.

Приведенная постановка записана для одной материальной точки макроуровня (представительного макрообъема), для которой известна история внешних воздействий, что соответствует однородно деформируемому образцу с известными граничными условиями. При решении краевой задачи на уровне неоднородно деформируемой конструкции поля $\hat{\mathbf{V}}\mathbf{V}(\mathbf{r}, t)$, $\Theta(\mathbf{r}, t)$ неизвестны, в математическую постановку краевой задачи на макроуровне добавляются уравнение движения (для квазистатической задачи – уравнение равновесия) и граничные условия. Приведем ее далее.

В качестве базы для этой постановки использован материал монографий [102, 103], формулировка осуществлена совместно с научным консультантом П.В.Трусовым и А.Ю.Янцем. Постановка приведена только для деформируемой области, взаимодействие с абсолютно твердыми телами, включенными в расчетную схему (обычно используемыми для введения воздействий от обрабатывающих инструментов), описываются через граничные условия (кинематические, силовые или смешанные, температурные). Поскольку неупруго

деформируемые тела относятся к материалам с памятью [124, 135], следует учитывать необходимость отслеживать историю изменения переменных (деформаций, напряжений, температур) для материальных частиц на макроуровне. Наиболее простой способ это сделать – ввести лагранжевы координаты $\{q_i\}$ (задать определенную их связь с пространственными в отсчетный момент времени, в процессе деформирования лагранжевы координаты каждой материальной частицы не меняются). Можно отметить, что при использовании для решения краевой задачи МКЭ в лагранжевой постановке отслеживание историй изменений переменных для материальных частиц происходит автоматически (материальные частицы связаны с конечными элементами; следует отметить, что в случае больших неупругих деформаций возникает необходимость в регулярных перестройках КЭ-сетки, при этом необходимо обеспечить «сохранение памяти» при этих перестроениях для материальных частиц). Отметим также, что для многоуровневых моделей материалов с внутренними переменными хранить всю предысторию изменения воздействий и характеристик материала для отдельных материальных точек не требуется (достаточно текущих значений всех параметров, память о предыстории воздействий и их влияния на материал хранят внутренние переменные [135, 144]; п.1.2). Заметим, что краевые задачи, возникающие при исследовании процессов обработки с интенсивными неупругими деформациями, относятся к геометрически нелинейным проблемам, с априори неизвестными, непрерывно изменяющимися границами, зонами контакта с обрабатывающим инструментом. В связи с этим для решения подобных задач в большинстве случаев используются постановки в скоростной форме. Рассмотрим постановку задачи исследования поведения некоторой области макроскопических размеров, подвергаемую предписанным термомеханическим воздействиям.

Пусть в некоторый момент времени $t \in (0, \infty)$ исследуемое деформируемое тело B занимает область $\mathbf{r} \in \Omega^t$, $\Omega^t \in \mathbb{R}^3$ (трехмерное пространство) с границей $S^t = S_v(t) \cup S_\sigma(t) \cup S^{cont}(t) = S_1(t) \cup S_2(t) \cup S_3(t)$, $S_v(t), S_\sigma(t)$ – части границы, на которых заданы соответственно кинематические и силовые воздействия, для рассматриваемой задачи $S_\sigma(t) = S^{free}(t) \cup S^{\sigma load}(t)$, $S^{free}(t)$ – свободная граница,

$S^{\sigma load}(t)$ – граница с нетривиальными приложенными усилиями, $S^{cont}(t)$ – граница контакта (смешанные граничные условия), $S_i(t)$ – часть поверхности с температурными граничными условиями i -го рода, $\bar{\Omega}^t = \Omega^t \cup S^t$. Так как отслеживается движение материальных точек $\mathbf{r} = \mathbf{r}(\xi, t)$ (лагранжев закон движения, ξ – вектор лагранжевых координат), то можно считать, что известно и обратное преобразование $\xi = \xi(\mathbf{r}(t), t)$ для всех точек моделируемой области $\mathbf{r} \in \Omega^t$, $\Omega^t \subset \mathbb{R}^3$ (при реализации МКЭ это преобразование находить не требуется – точки интегрирования автоматически ассоциируются с материальными частицами, т.е. $\mathbf{r}(t)$ связан с $\xi(t)$).

Необходимо определить поля температур $\Theta(\mathbf{r}, t)$, скоростей перемещений $\mathbf{V}(\mathbf{r}, t)$, напряжений $\Sigma(\mathbf{r}, t)$ и деформаций $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ (компоненты этих величин в лабораторной системе координат) для любого $t \in (0, \infty)$, $\mathbf{r} \in \Omega^t$, $\Omega^t \subset \mathbb{R}^3$, удовлетворяющие следующей системе уравнений:

уравнениям равновесия в скоростях [103]

$$\hat{\nabla} \cdot \dot{\Sigma} - \hat{\nabla} \cdot (\mathbf{V} \cdot \hat{\nabla} \Sigma) + \dot{\mathbf{F}} - \mathbf{V} \cdot \hat{\nabla} \mathbf{F} = \mathbf{0}, \quad \mathbf{r} \in \Omega^t, \quad ^1$$

ОС

$$\dot{\Sigma}_{\xi} = \mathbf{P}_{\xi} : \mathbf{Z}_{\xi}^e - \Sigma_{\xi} \cdot \Omega_{\xi} + \Omega_{\xi} \cdot \Sigma_{\xi} + \mathbf{B}_{\xi} \dot{\Theta}, \quad \mathbf{r} \in \bar{\Omega}^t, \quad ^2$$

(В рамках многоуровневого подхода в качестве ОС используется конститутивная модель, содержащаяся в вышеприведенной постановке – без задания кинематических и температурных воздействий: они определяются из решения рассматриваемой краевой задачи.)

кинематическим соотношениями:

$$\mathbf{Z}_{\xi} = \hat{\nabla} \mathbf{V}_{\xi}^T - \Omega_{\xi} = \mathbf{E}_{\xi}^{CR} \equiv \dot{\mathbf{E}}_{\xi} - \Omega_{\xi} \cdot \mathbf{E}_{\xi} + \mathbf{E}_{\xi} \cdot \Omega_{\xi}, \quad \mathbf{r} \in \bar{\Omega}^t,$$

где \mathbf{E} – мера деформированного состояния,

уравнению теплопроводности

¹ В уравнении равновесия переменные рассматриваются как функции $(\mathbf{r}(t), t)$.

² В ОС все переменные зависят от $(\xi(\mathbf{r}(t), t), t)$. ОС применяется для материальной точки, находящейся в текущий момент в точке пространства $\mathbf{r} \in \bar{\Omega}^t$. Здесь и в последующих уравнениях величины, определяемые для материальной точки ξ , находящейся в точке пространства \mathbf{r} , обозначены индексом $(\cdot)_{\xi}$.

$$c\hat{\rho}\dot{\Theta} = \hat{\nabla} \cdot (\lambda \hat{\nabla} \Theta) + Q, \quad \mathbf{r} \in \Omega^t,^3$$

граничным кинематическими условиям

$$\mathbf{V} = \mathbf{V}^*, \quad \mathbf{r} \in S_v^t,$$

граничным силовым условиям

$$\mathbf{n} \cdot \dot{\Sigma} - (\hat{\nabla} \mathbf{V} \cdot \mathbf{n}) \cdot \Sigma + (\mathbf{n} \cdot \hat{\nabla} \mathbf{V} \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n} \cdot \Sigma = \dot{\mathbf{T}}, \quad \mathbf{r} \in S_\sigma^t,$$

граничным температурным условиям

1 рода

$$\Theta(\mathbf{r}) = \Theta^*, \quad \mathbf{r} \in S_1^t,$$

2 рода

$$\lambda(\mathbf{n} \cdot \hat{\nabla} \Theta) = q^*, \quad \mathbf{r} \in S_2^t,$$

3 рода

$$\lambda(\mathbf{n} \cdot \hat{\nabla} \Theta) = -\alpha(\Theta - \Theta_\infty), \quad \mathbf{r} \in S_3^t,$$

при начальных условиях

кинематических

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}) = \mathbf{0}, \quad \mathbf{r} \in \bar{\Omega}^0,$$

статических

$$\hat{\nabla} \cdot \Sigma^0 + \hat{\mathbf{F}}^0 = \mathbf{0}, \quad \mathbf{r} \in \Omega^0,$$

$$\mathbf{n} \cdot \Sigma^0 = \hat{\mathbf{T}}^0, \quad \mathbf{r} \in S_\sigma^0,^4$$

и температурных

$$\Theta = \Theta^0(\mathbf{r}), \quad \mathbf{r} \in \bar{\Omega}^0.$$

Перемещения \mathbf{U} и напряжения Σ для материальной частицы определяются интегрированием (с учетом определяемого при решении лагранжева закона движения $\xi = \xi(\mathbf{r}(t), t)$):

$$\mathbf{U}(\xi, t) = \int_0^t \mathbf{V}(\mathbf{r}(\xi, \tau), \tau) d\tau, \quad \xi \in \bar{\Omega}^0,$$

³ Источник Q определяется соответствующими соотношениями многоуровневой конститутивной модели

⁴ Если отсчетная конфигурация является естественной, то $\hat{\mathbf{T}}^0 = \mathbf{0}$, $\hat{\mathbf{F}}^0 = \mathbf{0}$, $\Sigma^0 = \mathbf{0}$ и начальные условия выполняются автоматически.

$$\Sigma_{\zeta}(\xi, t) = \Sigma_{\zeta_0}(\xi) + \int_0^t \dot{\Sigma}_{\zeta}(\mathbf{r}(\xi, \tau), \tau) d\tau, \quad \xi \in \bar{\Omega}^0,$$

$$\Sigma_{\zeta}(\xi, t) = \Sigma_{\zeta_0}(\xi) + \int_0^t \dot{\Sigma}_{\zeta}(\mathbf{r}(\xi, \tau), \tau) d\tau, \quad \xi \in \bar{\Omega}^0.$$

В приведенной постановке краевой задачи:

$\hat{\nabla}$ – набла-оператор (векторный дифференциальный оператор Гамильтона в текущем лагранжевом базисе), \mathbf{F} – вектор массовых сил.

c , $\hat{\rho}$ – удельная теплоемкость и плотность, λ – коэффициент теплопроводности, Q – мощность тепловых источников,

\mathbf{n} – вектор единичной нормали к границе, $\dot{\mathbf{T}}$ – заданная скорость изменения вектора поверхностных усилий,

Θ^* – заданная температура, q^* – заданный тепловой поток, α – коэффициент теплоотдачи, Θ_{∞} – температура окружающей среды. С алгоритмами решения поставленной краевой задачи для стационарных и нестационарных вариантов можно познакомиться в работах [102, 103, 139].

Если в приведенной постановке краевой задачи в качестве ОС предполагается применять не статистическую модель ПО макроуровня поликристалла, а соотношения мезоуровня для отдельного кристаллита:

$$\mathbf{K} = \mathbf{k},$$

$$\dot{\mathbf{k}} + \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\omega} - \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{k} = \mathbf{n} : (\mathbf{I} - \boldsymbol{\omega} - \mathbf{z}^{\text{in}} - \mathbf{z}^{\text{th}}),$$

...остальные соотношения модели мезоуровня...

то такую модификацию постановки можно использовать для описания деформирования ПО моно- и поликристаллов с определением неоднородных полей НДС на мезоуровне – получаем прямую модель ФТП (п.1.3). Отметим, что прямую модель для описания ПО можно применить для решения задач моделирования конструкций как ОС (подмодель, определяющую поведение материала) в вышеприведенной постановке краевой задачи, однако очевидно, что такое моделирование будет на порядки более ресурсоемким, чем при использовании статистической модели материала.

5. Алгоритмы реализации и анализ результатов применения моделей для описания поведения моно- и поликристаллов

В п.5.1 представлены алгоритмы реализации двухуровневых моделей, основанных на численных методах интегрирования систем обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ). В п.5.2 приводится анализ результатов моделирования отдельных кристаллитов и поликристаллов при различных нагрузениях, сопоставляются результаты, полученные при применении разных формулировок мезоуровня, рассмотренных в п.4.1. В п.5.3 описывается методика оценки чувствительности моделей к возмущениям входных данных и результаты ее применения для двухуровневых моделей.

5.1. Краткое описание алгоритмов реализации математических моделей

Рассмотрим кратко алгоритмы численной реализации представленной в постановке в п.4.2 модели для описания поведения представительного макрообъема. Для решения задачи используется пошаговая процедура, на каждом шаге которой устанавливается НДС кристаллитов, входящих в ПО, а также значения всех внутренних переменных модели. Реализация алгоритма на каждом шаге проходит в три этапа [83, 84, 165]: получение решения в скоростях, интегрирование системы ОДУ с позиций наблюдателя, связанного с ПСК, и переопределение всех параметров модели в связи с изменением ориентаций кристаллитов на конец шага по времени (все материальные параметры считаются при этом «вмороженными» в ПСК; математически это означает, что для связанного с фиксированной ЛСК наблюдателя величины изменяются по скоростному закону с коротационной производной [146]).

Приведем описание алгоритма для наиболее простой схемы интегрирования – явной схемы Эйлера, имеющей первый порядок точности, однако отметим, что могут быть использованы и схемы интегрирования более высокого порядка (например, схемы Рунге-Кутты, метод «предиктор-корректор» Адамса – Моултона и др.).

В момент начала деформирования ($t_i = 0$) все переменные модели известны, например, может приниматься гипотеза о естественной начальной конфигурации. Пусть на начало $t = t_i$ некоторого временного шага $t \in [t_i, t_{i+1}]$ известны значения параметров отклика и всех внутренних переменных (равные значениям соответствующих параметров на конец предыдущего временного шага), используемых в постановке, приведенной в п.4.2. Необходимо определить значения переменных модели на конец временного шага $t = t_{i+1}$, для чего выполняются последовательно следующие шаги.

1. Вычисления на мезоуровне (в цикле по кристаллитам)

Расчет для каждого кристаллита производится в базисе ПСК (индекс кристаллита опущен).

1.1. Определение скоростей изменений переменных

По соотношениям, приведенным в постановке в п.4.2, вычисляются скорости сдвигов $\dot{\gamma}^{(k)}(t_i)$, $k = 1, \dots, K$, скорости критических напряжений $\dot{\tau}_c^{(k)}(t_i)$, $k = 1, \dots, K$, скорость неупругих деформаций $\mathbf{z}^{\text{in}}(t_i) = \sum_{k=1}^K \dot{\gamma}^{(k)}(t_i) \mathbf{b}^{(k)}(t_i) \mathbf{n}^{(k)}(t_i)$ (здесь и далее – компоненты в ПСК), скорость термической деформации $\mathbf{z}^{\text{th}}(t_i) = \alpha \dot{\theta}(t_i)$, скорость упругих деформаций $\mathbf{I}^e(t_i) = \mathbf{I}(t_i) - \mathbf{z}^{\text{in}}(t_i) - \mathbf{z}^{\text{th}}(t_i)$. Определяется мощность температурного источника $q(t_i) = \alpha \boldsymbol{\sigma}(t_i) : \mathbf{z}^{\text{in}}(t_i) / \hat{\rho}(t_i)$. Вычисляется спин ПСК $\boldsymbol{\omega}(t_i) = \boldsymbol{\omega}(\mathbf{I}^e(t_i), \mathbf{k}_1(t_i), \mathbf{k}_2(t_i), \mathbf{k}_3(t_i))$.

1.2. Интегрирование переменных

Для дифференциального уравнения $dy/dt = f(t, y)$ схема интегрирования Эйлера имеет вид:

$$y_{i+1}(t_{i+1}) = y_i(t_i) + \Delta t f(t_i, y_i),$$

где $\Delta t = t_{i+1} - t_i$ — шаг по времени. С применением указанной схемы определяются значения всех переменных (компоненты в ПСК) на конец шага –

сдвиги $\gamma^{(k)}(t_{i+1})$, критические напряжения $\tau_c^{(k)}(t_{i+1})$, компоненты тензора напряжений $\mathbf{k}(t_{i+1})$ в ПСК:

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{k}}_{nj}(t_i) &= \Pi_{njkl}(t_i) \left(I_{lk}(t_i) - \omega_{lk}(t_i) - z_{lk}^{\text{in}}(t_i) - z_{lk}^{\text{th}}(t_i) \right), \\ \mathbf{k}_{nj}(t_{i+1}) &= \mathbf{k}_{nj}(t_i) + \Delta t \dot{\mathbf{k}}_{nj}(t_i). \end{aligned} \quad (5.1.1)$$

1.3. Изменение ориентаций кристаллитов

Поскольку интегрирование уравнения $\dot{\mathbf{o}} \cdot \mathbf{o}^T = \boldsymbol{\omega}$ с прямым применением схемы Эйлера приведет к нарушению ортогональности тензора $\mathbf{o}(t_{i+1})$ на конец шага, применяется следующий способ для его определения.

По тензору спина $\boldsymbol{\omega}$ устанавливается соответствующий вектор скорости поворота: $\dot{\boldsymbol{\phi}} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\epsilon} : \boldsymbol{\omega}$, где $\boldsymbol{\epsilon}$ – тензор Леви-Чивиты, далее последовательно определяются: мгновенная ось поворота $\mathbf{e}(t_i) = \dot{\boldsymbol{\phi}}(t_i) / |\dot{\boldsymbol{\phi}}(t_i)|$, приращение угла поворота $\Delta\phi(t_i) = \Delta t |\dot{\boldsymbol{\phi}}(t_i)|$, приращение тензора поворота за текущий шаг $\Delta\mathbf{o}(t_i) = [1 - \cos(\Delta\phi(t_i))] \mathbf{e}(t_i) \mathbf{e}(t_i) + \cos(\Delta\phi(t_i)) \mathbf{E} + \sin(\Delta\phi(t_i)) \mathbf{e}(t_i) \times \mathbf{E}$ (здесь \mathbf{E} – единичный тензор). В итоге тензор ориентации ПСК на конец шага определяется как

$$\mathbf{o}(t_{i+1}) = \Delta \mathbf{r}(t_i) \cdot \mathbf{o}(t_i).$$

Обратим внимание, что при повороте ПСК компоненты тензора напряжений в базисе ПСК, определенные на этапе 1.2, полагаются фиксированными, для неподвижного наблюдателя в ЛСК это отражается в изменении тензора напряжений в соответствии с коротационной добавкой $(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\omega} - \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{k}) \Delta t$. Таким образом, интегрирование мезонапряжений с позиций подвижного наблюдателя по (5.1.1) с учетом последующего поворота ПСК эквивалентно коротационному интегрированию мезонапряжений с позиций неподвижного наблюдателя, связанного с ЛСК:

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_{nj}^{\text{ЛСК}}(t_{i+1}) &= \mathbf{k}_{nj}^{\text{ЛСК}}(t_i) - \Delta t \mathbf{k}_{nm}^{\text{ЛСК}}(t_i) \cdot \boldsymbol{\omega}_{mj}^{\text{ЛСК}}(t_i) + \Delta t \boldsymbol{\omega}_{nm}^{\text{ЛСК}}(t_i) \cdot \mathbf{k}_{mj}^{\text{ЛСК}}(t_i) + \\ &+ \Delta t \Pi_{njkl}^{\text{ЛСК}}(t_i) \left(I_{lk}^{\text{ЛСК}}(t_i) - \omega_{lk}^{\text{ЛСК}}(t_i) - z_{lk}^{\text{in ЛСК}}(t_i) - z_{lk}^{\text{th ЛСК}}(t_i) \right). \end{aligned}$$

2. Вычисления на макроуровне

Алгебраические операции с тензорзначными переменными осуществляются в терминах их компонент, для чего участвующие в них тензоры должны быть определены компонентами в едином базисе. В связи с этим при реализации операций на макромасштабном уровне (в частности – осреднения) тензорзначные параметры, характеризующие состояние отдельных кристаллитов и изначально определенные компонентами в базисе ПСК, должны быть преобразованы в тензоры с компонентами в базисе ЛСК; связь компонент осуществляется с помощью тензора $\mathbf{o}(t_i)$.

Определяются текущие значения внутренних переменных макроуровня: тензора спина $\mathbf{\Omega}(t_i) = \langle \boldsymbol{\omega}_{(n)}(t_i) \rangle$, $n = 1, \dots, N$, тензора эффективных упругих свойств $\mathbf{P}(t_i) = \langle \mathbf{p}_{(n)}(t_i) \rangle$, $n = 1, \dots, N$, флуктуаций (отклонений от среднего в отдельных кристаллитах) $\mathbf{p}'_{(n)}(t_i) = \mathbf{p}_{(n)}(t_i) - \langle \mathbf{p}_{(n)}(t_i) \rangle$, $\mathbf{z}^{\text{in}'}_{(n)}(t_i) = \mathbf{z}^{\text{in}}_{(n)}(t_i) - \langle \mathbf{z}^{\text{in}}_{(n)}(t_i) \rangle$, $\mathbf{z}^{\text{th}'}_{(n)}(t_i) = \mathbf{z}^{\text{th}}_{(n)}(t_i) - \langle \mathbf{z}^{\text{th}}_{(n)}(t_i) \rangle$, $\boldsymbol{\omega}'_{(n)}(t_i) = \boldsymbol{\omega}_{(n)}(t_i) - \langle \boldsymbol{\omega}_{(n)}(t_i) \rangle$, $\mathbf{k}'_{(i)}(t_i) = \mathbf{k}_{(n)}(t_i) - \langle \mathbf{k}_{(n)}(t_i) \rangle$, $n = 1, \dots, N$. Затем вычисляются неупругая $\mathbf{Z}^{\text{in}}(t_i)$ и температурная $\mathbf{Z}^{\text{th}}(t_i)$ составляющие тензора деформации скорости. В итоге устанавливается скорость изменения напряжений, для наблюдателя в ЛСК – с использованием следующих соотношений (используется соглашение Эйнштейна):

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{K}}_{nj}^{\text{ЛСК}}(t_i) = & -\mathbf{K}_{nm}^{\text{ЛСК}}(t_i) \boldsymbol{\Omega}_{mj}^{\text{ЛСК}}(t_i) + \boldsymbol{\Omega}_{nm}^{\text{ЛСК}}(t_i) \mathbf{K}_{mj}^{\text{ЛСК}}(t_i) + \\ & + \Pi_{njkl}^{\text{ЛСК}}(t) \left(L_{lk}^{\text{ЛСК}}(t_i) - \boldsymbol{\Omega}_{lk}^{\text{ЛСК}} - \mathbf{Z}_{lk}^{\text{in ЛСК}}(t_i) - \mathbf{Z}_{lk}^{\text{th ЛСК}}(t_i) \right), \end{aligned}$$

определяются напряжения на конец шага $\mathbf{K}_{nj}^{\text{ЛСК}}(t_{i+1}) = \mathbf{K}_{nj}^{\text{ЛСК}}(t_i) + \Delta t \dot{\mathbf{K}}_{nj}^{\text{ЛСК}}(t_i)$.

Определяется мощность тепловых источников

$$\mathbf{Q}(t_i) = \langle \mathbf{q}_{(n)}(t_i) \rangle, n = 1, \dots, N.$$

Аналогично пункту 1.3 определяется положение ПСК макроуровня на конец шага.

Отметим, что есть возможность распараллеливания программного кода, реализующего описанный алгоритм – распределением вычислений для мезоуровня

по нескольким вычислительным узлам. Вместе с тем при решении краевых задач со статистическими моделями материалов (постановка краевой задачи в п.4.2) такое распараллеливание вычислений на уровне ПО обычно не используется, поскольку более эффективным является распределение по узлам определения отклика для разных точек интегрирования, которых в задачах моделирования технологических процессов достаточно много.

При описании алгоритма полагались полностью известными градиент скорости перемещений $\mathbf{L}(t)$ – рассматривалось кинематическое нагружение, поскольку предлагаемая статистическая модель использует обобщенную гипотезу Фойгта. В некоторых случаях известной является только часть компонент $\mathbf{L}(t)$ в ЛСК, тогда как остальные находятся из условия удовлетворения предписанному напряженному состоянию [145, 165]. Заметим, что трудности реализации смешанного задания нагружения возникают при использовании в статистических моделях и других гипотез (например, Рейсса или Кренера). Рассмотрим данную ситуацию на примере одноосного сжатия (для определенности – вдоль оси Ox_3 фиксированной ЛСК); в этом случае на макроуровне для удовлетворения предписанного смешанного нагружения должны быть выполнены следующие соотношения:

$$\begin{cases} \dot{K}_{ij}^{ЛСК} = 0, (ij) \neq (33), \\ L_{33}^{ЛСК} = L_{33}^{ЛСК*}, \end{cases} \quad (5.1.2)$$

где $(\cdot)_{ij}^{ЛСК}$ – компоненты тензора 2-го ранга в фиксированной ЛСК; в (5.1.2) принято, что скорость деформации $L_{33}^{ЛСК*}$ вдоль направления осадки известна. Однако для использования предлагаемых моделей материалов нагружение должно быть задано только в кинематических переменных; для определения неизвестных компонент $L_{ij}^{ЛСК}, (ij) \neq (33)$ используются первая группа уравнений (5.1.2). С учетом определяющего уравнения макроуровня данная система принимает вид:

$$\begin{cases} \Omega_{im}^{ЛСК} (L_{pq}^{ЛСК}) K_{mj}^{ЛСК} - K_{im}^{ЛСК} \Omega_{mj}^{ЛСК} (L_{pq}^{ЛСК}) + \\ + \Pi_{ijkl}^{ЛСК} (L_{lk}^{ЛСК} - \Omega_{lk}^{ЛСК} - Z_{lk}^{inЛСК} - Z_{lk}^{thЛСК}) = 0, (ij) \neq (33), \\ L_{33}^{ЛСК} = L_{33}^{ЛСК*}. \end{cases} \quad (5.1.3)$$

В системе обозначено, что в общем случае спин зависит от прикладываемых кинематических воздействий $\Omega_{im}^{JCK} = \Omega_{im}^{JCK} \left(L_{pq}^{JCK} \right)$.

В силу симметрии тензора Π_{ijkl}^{JCK} система (5.1.3) имеет всего 6 независимых уравнений, поэтому для соответствия числа уравнений числу неизвестных необходимо принять дополнительную гипотезу, в качестве которой принимается, что при осадке транспонированный градиент скорости перемещений $\mathbf{L}(t)$ – симметричный. Для модели поворота решетки Тейлора (спин \mathbf{T} , приведенный в п.4.1) в этом случае тензор спина перестает зависеть от $\mathbf{L}(t)$ и при использовании схемы Эйлера выполнение (5.1.3) легко обеспечить, решив систему с параметрами, определенными на начало шага [145].

Для спина \mathbf{PI} , используемого в предлагаемой в п.4.2 постановке, как и для более сложных моделей ротации решетки, для определения воздействия (симметричного транспонированного градиента скорости перемещений \mathbf{L}) необходимо использовать итерационную процедуру. В качестве начального приближения используется значение \mathbf{L} с предыдущего шага, затем в цикле вычисляется $\mathbf{\Omega}$ с использованием модели мезоуровня, значений переменных на начало шага и текущего \mathbf{L} , после чего решается система (5.1.3) для определения скорректированного значения \mathbf{L} ; при выполнении условия $\|\mathbf{L}_{iter-1} - \mathbf{L}_{iter}\| \leq \varepsilon$, где \mathbf{L}_{iter} – значение \mathbf{L} на текущей итерации, \mathbf{L}_{iter-1} – на предыдущей, ε – заданное малое число, итерационная процедура завершается.

Аналогичная процедура может быть реализована и для отдельного кристаллита – с использованием в (5.1.2), (5.1.3) переменных мезоуровня вместо соответствующих макропеременных.

Процедура реализации одноосного нагружения является весьма важной, поскольку большая часть экспериментальных данных получена именно для таких опытов, с ними сравниваются результаты моделирования (п.5.2, гл.6). Подобная процедура может быть реализована и для других видов нагружений с ограничениями на вид тензора макронапряжений, например, стесненной осадки [431].

Краткое описание алгоритма реализации трехуровневой модели для описания сверхпластического деформирования приводится в гл.6.

5.2. Анализ результатов моделирования отдельных кристаллитов и поликристаллов

В этом разделе сведена информация о результатах численных расчетов, полученных с применением предложенных конститутивных моделей материалов. При моделировании полагалась справедливой гипотеза об однородности НДС образца на макроуровне (в МДТТ под образцом понимается однородно деформируемое тело [16, 30, 33, 103]).

Моделирование изменения ориентировки кристаллита при одноосном растяжении и сжатии

Если использовать в постановке приведенной в п.4.2 задачи исследования поведения ПО в качестве выборки только один кристаллит, то получаем модель, которую можно использовать для анализа однородного НДС монокристаллического образца. Разумеется, при более детальном моделировании с применением прямой модели получаемые поля НДС будут неоднородными по образцу уже при малых деформациях [148]; тем не менее, приближенное исследование также является полезным – для понимания характерных тенденций поведения материала.

Прежде всего, рассмотрим результаты моделирования поведения материалов при нагружениях, соответствующих наиболее распространенным натурным экспериментам, в первую очередь – одноосному растяжению и сжатию (алгоритм реализации модели для таких нагружений рассмотрен в п.5.1).

В вычислительных экспериментах использовалась упруговязкопластическая модель, описанная в п.4.2; в качестве моделируемого материала принималась чистая медь, независимые упругие модули равны: $\Pi_{1111} = 168.4$ ГПа, $\Pi_{1122} = 121.4$ ГПа, $\Pi_{1212} = 75.4$ ГПа [172], $\dot{\gamma}_0 = 0.001 \text{ с}^{-1}$, $1/m = 0.012$, использовался изотропный закон упрочнения $\tau_c = f(\gamma_\Sigma) = 15 + 52 \gamma_\Sigma^{0.45}$, $\gamma_\Sigma = \sum_{k=1}^K \gamma^{(k)}$. В [128] для

аналогичных расчетов была использована модифицированная модель Линя (п.2.2) без упрочнения. Для определенности принято, что растяжение (осадка) происходит вдоль оси OX_3 фиксированной ЛСК.

Для демонстрации ротаций монокристаллов удобно использовать обращенное движение [154]: изображение движения направления оси растяжения (сжатия) на стандартном стереографическом треугольнике, построенном в кристаллографической системе координат (КСК); иначе говоря, направление оси растяжения (сжатия) определяются с позиций подвижного наблюдателя в ПСК, вращающегося вместе с кристаллической решеткой. Точка на стереографической проекции, показывающая в каждый момент деформирования направление оси растяжения (сжатия), называется изображающей точкой (оси) растяжения (ИТР).

В монографии [154] представлены полученные на основе теоретического рассмотрения движения ИТР по поверхности (многограннику) текучести ГЦК-кристаллита данные (рис.5.2.1) об ожидаемом числе действующих СС при соответствующем отображении направления оси растяжения на стандартном стереографическом треугольнике (т.е. при рассмотрении обращенного движения).



Рис. 5.2.1. Действующие СС в ГЦК-кристаллите при особых ориентировках [154]

Если проекция направления растяжения будет находиться внутри стереографического треугольника (рис.5.2.1), то активируется только одна СС. При случайном выборе ориентации зерна ситуация «попадания» проекции оси растяжения на сторону или в вершину стереографического треугольника маловероятна, чаще она будет находиться внутри стереографического треугольника. Результаты расчетов без учета поворотов решетки и упрочнения

подтверждают, что при случайной ориентации монокристалла, когда точное попадание проекции направления растяжения на сторону или в вершину стереографического треугольника маловероятно, в определенный момент времени активной становится только одна СС (рис.5.2.2, при расчете было принято $\tau_c^{(k)}(0) = \tau_{c0} = 15$ МПа, $k = 1, \dots, K$), что согласуется с данными [154] и с механическими соображениями.

В упругопластической модели для каждого случайно ориентированного зерна изображающая точка в пространстве напряжений (ИТН) достигает грани поверхности текучести (многогранника) и постоянно находится в этой точке (на рис.5.2.2 приводятся кривые, полученные без учета ротаций решетки и упрочнения для 125 случайно ориентированных зерен). Для каждого отдельного зерна действительно реализуется одноосное растяжение (на рис. 5.2.2 приведены компоненты напряжений на начальном этапе, в дальнейшем они неизменны): в ЛСК нетривиальна только компонента σ_{33} , при этом в базисе КСК нетривиальными могут быть все компоненты тензора напряжений (рис.5.2.3). При использовании упруговязкопластической модели поведение ИТН близко к указанному (за счет значительного показателя скоростной чувствительности $1/m = 0.012$ в вязкопластическом законе для скоростей сдвигов).

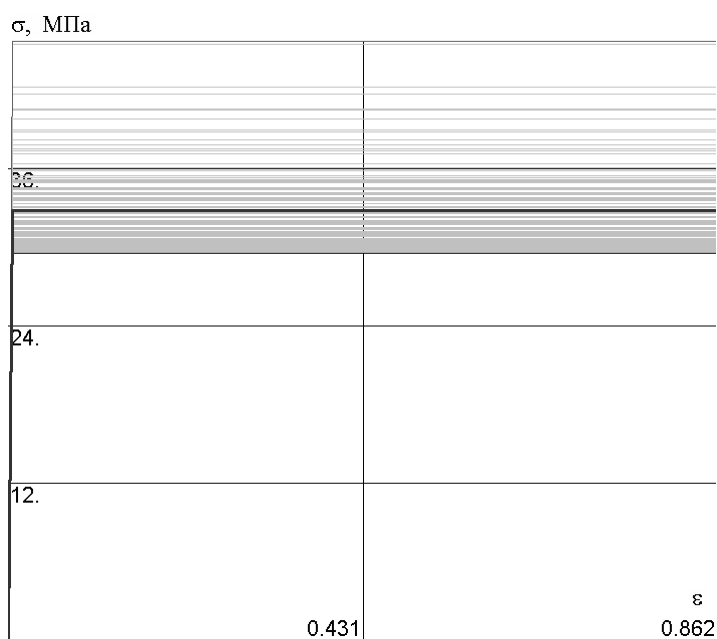


Рис. 5.2.2. Диаграммы « $\sigma - \epsilon$ » для различно ориентированных 125 монокристаллов (полужирным – осредненная кривая)

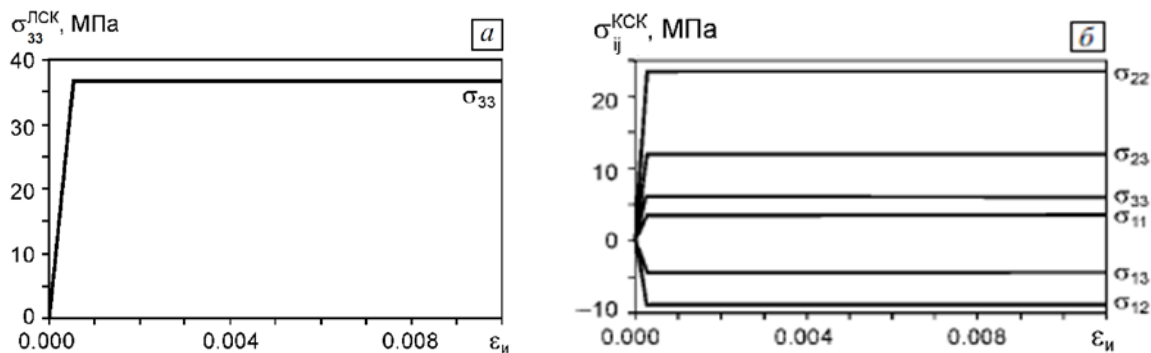


Рис.5.2.3. Изменение компонент тензора напряжений для случайно ориентированного зерна в ЛСК (а) и КСК (б)

При задании такой ориентировки монокристалла, для которой проекция направления растяжения располагается на стороне или в вершине стереографического треугольника, критерий текучести выполняется одновременно [128] на таком же числе СС, как указано на рис. 5.2.1 [154].

При рассмотрении одноосного растяжения с учетом поворотов согласно модели Тейлора происходит поворот кристалла, приводящий к выходу проекции оси растяжения на границу соседних стереографических треугольников (при рассмотрении обращенного движения). Затем проекция оси растяжения в случае изотропного упрочнения начинает двигаться по стороне стереографического треугольника до попадания в вершину; на рис.5.2.4 приведено движение проекции оси растяжения для кристаллита со случайно выбранной начальной ориентировкой. Отметим, что конкретный вид закона упрочнения при этом роли не играет, важно лишь, чтобы оно было изотропным (одинаковым для всех СС кристалла).

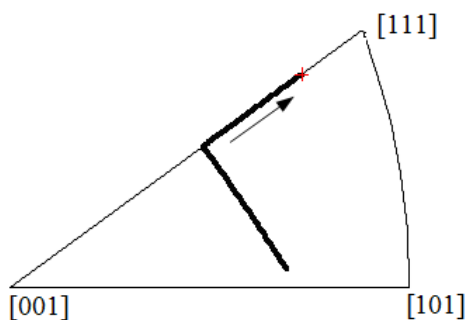


Рис.5.2.4. Траектория ИТР для монокристалла с определенной начальной ориентацией при растяжении (крестом обозначено конечное положение)

Первой активируется СС №4 (СС ГЦК-кристаллита приведены на рис.2.2.1), при выходе проекции направления растяжения на границу активируется СС №20 (рис.2.2.1, СС №8 с обратным направлением сдвига). Так как из вышеприведенных физических соображений скорости сдвигов по этим СС будут совпадать (для упруговязкопластической модели – будут близки), спин \mathbf{T} (4.1.9) (по Тейлору) будет равен

$$\begin{aligned}\bar{\omega}_T &= \frac{1}{2}((\hat{\nabla}\mathbf{v})^T - \hat{\nabla}\mathbf{v}) + \sum_{i=1}^K \frac{1}{2} \dot{\gamma}^i (\mathbf{n}^i \mathbf{b}^i - \mathbf{b}^i \mathbf{n}^i) = \\ &= \frac{1}{2} \dot{\gamma} (\mathbf{b}^4 \mathbf{n}^4 - \mathbf{n}^4 \mathbf{b}^4 + \mathbf{b}^{20} \mathbf{n}^{20} - \mathbf{n}^{20} \mathbf{b}^{20}),\end{aligned}$$

в компонентах ПСК (т.е. неискаженной КСК) получаем:

$$[\bar{\omega}_T]_{ij} = \frac{\dot{\gamma}}{2} \begin{bmatrix} 0 & 0 & w \\ 0 & 0 & w \\ -w & -w & 0 \end{bmatrix}, \quad w = \sqrt{\frac{2}{3}} - \frac{1}{\sqrt{6}}.$$

Вектор угловой скорости $\boldsymbol{\varphi}$, ассоциированный с $\bar{\omega}_T$, в базисе ПСК определен соотношением:

$$\boldsymbol{\varphi} = w (-\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2). \quad (5.2.1)$$

С другой стороны, чтобы проекция направления растяжения двигалась по стороне треугольника, уже придя на нее, от направления [001] к [111], из геометрических соображений необходимо, чтобы вектор угловой скорости был вида:

$$\boldsymbol{\varphi}^* = \alpha \mathbf{k}_3 \times (\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3) = \alpha (\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1). \quad (5.2.2)$$

Соотношения (5.2.1) и (5.2.2) согласуются и, следовательно, по модели поворота Тейлора должно происходить движение по стороне стереографического треугольника до достижения вершины [111], которая является аттрактором для проекции оси растяжения для рассмотренного кристаллита. Аналогичный анализ был проведен для других ориентировок кристаллитов, в результате определено, что направление [111] является аттрактором для проекции оси растяжения при любых ориентировках кристаллитов, за исключением той, при которой проекция оси растяжения находится в вершине [001] стереографического треугольника. Отметим, что при указанной ориентировке активным и равноправными являются 8

СС, что приводит к отсутствию ротации кристаллита по модели Тейлора и при сжатии, и при растяжении (антисимметричная часть тензора скорости неупругой деформации нулевая в силу указанной симметрии).

Таким образом, для модели поворота по Тейлору аналитически, путем простого рассмотрения геометрии активных СС, достаточно просто показывается, что при одноосном растяжении должно происходить следующее движение оси растяжения относительно осей КСК: достижение стороны стереографического треугольника, затем – движение по стороне до достижения вершины [111], которая является аттрактором. Эти результаты согласуются с опытными данными, упоминаемыми в [18, 316]: при растяжении ось растяжения, изначально близкая к [001], стремится к направлению [001], в остальных начальных ориентировках – стремится к [111], при которой активными могут быть 6 СС (рис.5.2.5).

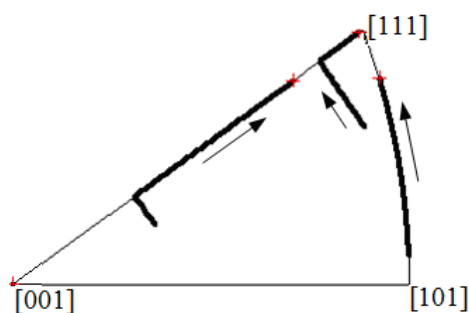


Рис.5.2.5. Траектория ИТР для различных начальных ориентаций зерна при растяжении

С применением аналогичной процедуры для различно ориентированных кристаллитов установлено, что при одноосном сжатии конечной ориентировкой (аттрактором) является [101], при которой скольжение осуществляется по четырем СС [115, 316] (рис.5.2.6), для всех ориентировок, кроме соответствующей нахождению проекции оси сжатия в вершине [001] стереографического треугольника.

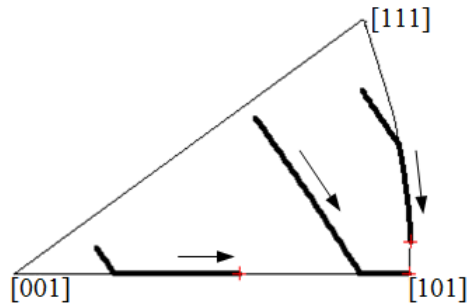


Рис.5.2.6. Траектория проекции оси сжатия для различных начальных ориентаций зерна (модель поворота Тейлора) при сжатии

Отметим, что при расчетах с другими моделями спина ПСК получаются результаты, близкие к приведенным выше, что является подтверждением близости формулировок, о которой говорится в п.4.1.

Сопоставление моделей: упругое деформирование

Рассмотрим результаты применения приведенных моделей $B_{скор}$ и A для моделирования некоторых кинематических (жестких) нагружений анизотропных металлических кристаллитов [169].

При моделировании ГЦК-кристалла использовались упругие свойства (постоянные для наблюдателя в подвижной «решеточной» системе координат), соответствующие меди, независимые компоненты тензора свойств в ПСК: $\pi_{111} = 168.4$ ГПа, $\pi_{112} = 121.4$ ГПа, $\pi_{1212} = 75.4$ ГПа [172], для ОЦК-кристалла – упругие свойства, соответствующие α -Fe, независимые компоненты тензора свойств в ПСК: $\pi_{111} = 200$ ГПа, $\pi_{112} = 137$ ГПа, $\pi_{1212} = 116$ ГПа [47]. Начальные ориентации КСК и ПСК совпадают и определяются путем последовательного поворота начально совмещенной с ЛСК системы координат для ГЦК-кристалла вокруг оси Ox^1 на угол $\phi_1 = 3.72$, вокруг оси Ox^2 – на угол $\phi_2 = 2.731$, вокруг оси Ox^3 – на угол $\phi_3 = 3.226$, для ОЦК-кристалла – вокруг оси Ox^1 на угол $\phi_1 = 4.936$, вокруг оси Ox^2 – на угол $\phi_2 = 2.736$, вокруг оси Ox^3 – на угол $\phi_3 = 2.017$ (углы поворота выбраны случайным образом).

Рассматривалось произвольно выбранное однородное аффинное упругое циклическое деформирование кристаллитов по замкнутому циклу

кинематического нагружения прямоугольного в отсчетной конфигурации параллелепипеда с квадратом в поперечном сечении (с длиной стороны L), расположенным в плоскости OX_1X_2 фиксированной ЛСК; упругие модули и ориентация кристаллита описаны выше. Движение определено градиентом деформации:

$$\begin{aligned} \mathbf{f}(t) = \mathbf{I} + \frac{r_d}{h} (1 - \cos(\varphi)) \sin(\varphi) (2 \sin(\varphi) + 4) \mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2 + \\ + 3 \frac{r_d}{h} (1 - \cos(\varphi)) \sin^2(\varphi) \mathbf{p}_2 \mathbf{p}_2, \end{aligned} \quad (5.2.3)$$

где $\varphi = 2\pi t$, $r_d / h = 0.00005$ – постоянный параметр, \mathbf{p}_i – базис неподвижной ЛСК, деформирование рассматривается на интервале времени $t \in [0, 1]$ с. В силу однородности деформирования радиус-вектор материальной точки тела в произвольный момент времени t определяется согласно $\mathbf{r}(t) = \mathbf{f}(t) \cdot \xi^i \mathbf{p}_i$, где ξ^i – лагранжевы координаты рассматриваемой точки. Для иллюстрации на рис.5.2.7 приведена траектория движения точки тела с лагранжевыми координатами $(0, L, 0)$.

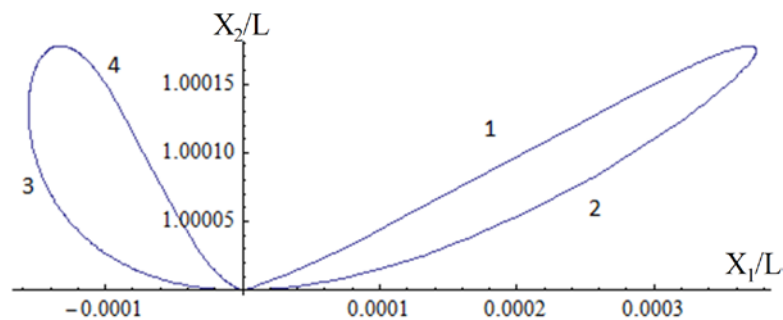


Рис. 5.2.7. Траектория движения (1–2–3–4) точки с лагранжевыми координатами $(0, L, 0)$ при движении (5.2.3), в начальный и конечный момент деформирования положение точки определяется координатами $X_1/L=0$, $X_2/L=1$, $X_3=0$

ПСК для каждого расчетного варианта в конечный момент времени приходит точно в свое начальное положение.

На рис. 5.2.8 приведены зависимости от времени компонент (в базисе ЛСК) тензора напряжений Коши для рассматриваемого ГЦК-кристаллита при использовании ОС в разгруженной (модель A) и в актуальной конфигурациях ($\mathbf{B}_{скор}$).

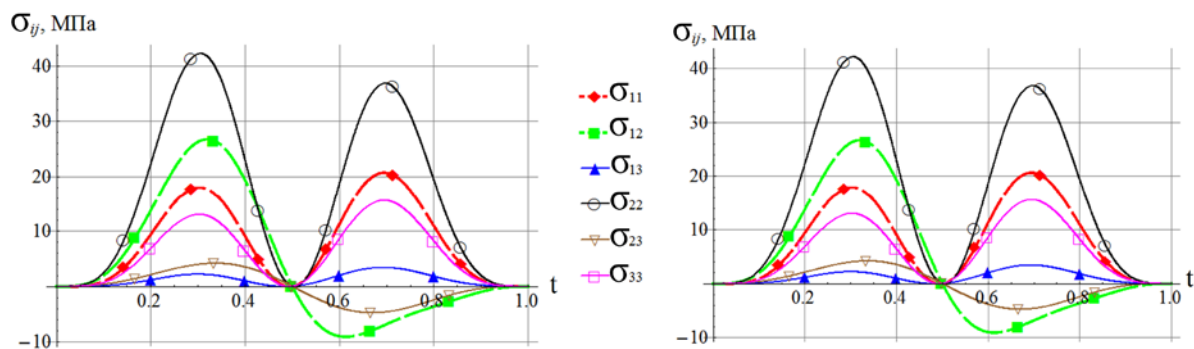


Рис. 5.2.8. Зависимость компонент тензора напряжений Коши в ЛСК от времени для ГЦК-кристаллита (слева – при использовании модели A , справа – при использовании модели $B_{скор}$)

Следует отметить близость результатов (визуально они неотличимы), при использовании модели A напряжения Коши получаются нулевыми в конце цикла (в пределах вычислительной погрешности), при использовании модели $B_{скор}$ напряжения близки к нулевым (максимальная по модулю компонента тензора напряжений Коши равна $7.56 \cdot 10^{-4}$ МПа).

На рис.5.2.9 приведена зависимость плотности внутренней энергии от времени (как и для рис.5.2.8, нижеприведенные графики рис. 5.2.9–5.2.11, построенные при использовании и одних, и других рассматриваемых соотношений визуально неотличимы, поэтому на рис. 5.2.9–5.2.11 приведены только графики одного из двух рассматриваемых вариантов соотношений).

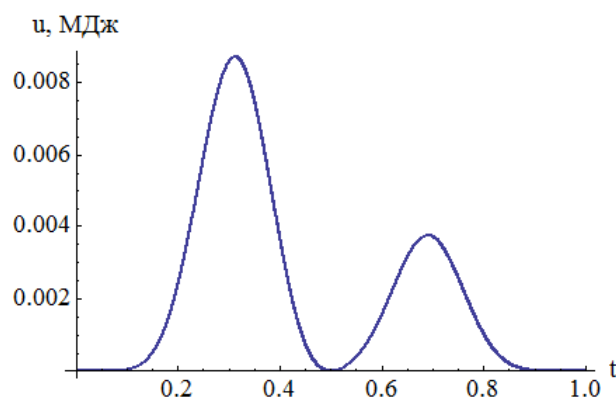


Рис. 5.2.9. Изменение плотности внутренней энергии со временем для ГЦК-кристаллита (при использовании модели A и при использовании модели $B_{скор}$)

Результаты свидетельствуют об отсутствии диссипации энергии при использовании модели A , при использовании модели $B_{\text{скор}}$ диссипация энергии близка к нулю ($9.53 \cdot 10^{-6}$ Дж).

На рис.5.2.10 приведены зависимости от времени компонент в ЛСК тензора напряжений Коши для рассматриваемого ОЦК-кристаллита.

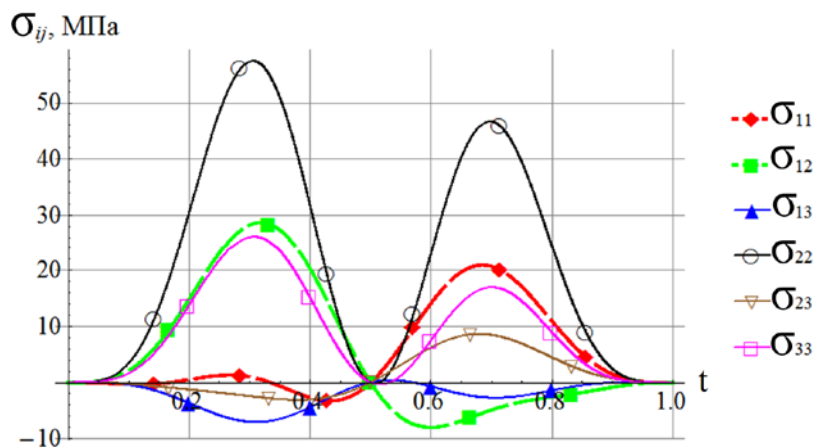


Рис. 5.2.10. Зависимость компонент тензора напряжений Коши в ЛСК от времени для ОЦК-кристаллита (при использовании модели A и при использовании модели $B_{\text{скор}}$)

При использовании модели A напряжения Коши получаются нулевыми в конце цикла (в пределах вычислительной погрешности), при использовании модели $B_{\text{скор}}$ напряжения близки к нулевым (максимальная по модулю компонента тензора напряжений Коши равна $4.76 \cdot 10^{-4}$ МПа).

На рис. 5.2.11 приведена зависимость плотности внутренней энергии от времени (графики для случаев использования разных ОС близки и визуально неотличимы).

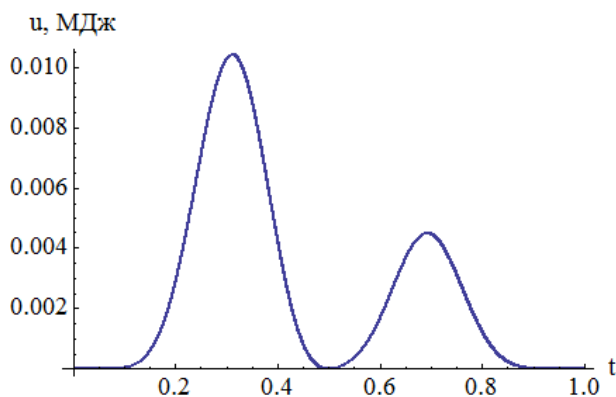


Рис. 5.2.11. Изменение плотности внутренней энергии со временем для ОЦК-кристаллита (при использовании модели A и при использовании модели $B_{\text{скор}}$)

Результаты свидетельствуют об отсутствии диссипации энергии при использовании уравнений модели A , при использовании модели $B_{\text{скор}}$ диссипация энергии близка к нулю ($7.57 \cdot 10^{-3}$ Дж).

Было рассмотрено упругое деформирование по множеству различных циклических траекторий деформации при разных ориентациях кристаллитов (примеры приведены в [143, 146, 428]). Полученные данные подтверждают аналитические выводы о том, что при использовании модели A (как следствие – модели B , выкладки приведены в п.4.1) требования отсутствия гистерезиса напряжений и диссипации энергии выполняются точно, при использовании модели $B_{\text{скор}}$ – приближенно с малой погрешностью. При рассмотрении нескольких циклов погрешность для модели $B_{\text{скор}}$ линейно нарастает [146], поэтому при анализе циклического упругого нагружения металлов и сплавов (например, при исследовании усталости) можно рекомендовать к использованию модель A , модель B или просто геометрически линейные соотношения [146]: реализуемые чисто упругие деформации малы, при этом результаты на отдельном цикле близки к результатам линейной модели.

Идентификация параметров закона упрочнения.

Сопоставление моделей: неупругое деформирование

Рассмотрим сопоставление результатов расчетов с применением рассмотренных моделей мезоуровня (при одинаковом во всех случаях определении спина PI по (3.2.12), различные модели спинов рассмотрены далее) для неупругого деформирования [164].

Моделировался ПО ГЦК-поликристалла, в рамках статистической модели представленный выборкой из 343 кристаллитов, начальные ориентации которых распределены случайно по равномерному закону. Упругие свойства на мезоуровне (постоянные для наблюдателя в ПСК) соответствуют меди, независимые компоненты тензора свойств в ПСК: $\pi_{1111} = 168.4$ ГПа, $\pi_{1122} = 121.4$ ГПа, $\pi_{1212} = 75.4$ ГПа [172]. Параметры моделей для описания неупругого деформирования: $\dot{\gamma}_0 = 0.001 \text{ с}^{-1}$, $1/m = 0.012$, параметры закона упрочнения –

$h_0 = 180$ МПа, $\tau_{\text{sat}} = 148$ МПа, $a = 2.25$, начальные значения критических напряжений для всех СС $\tau_c^{(k)}(0) = \tau_{c0} = 16$ МПа, $k = 1, \dots, K$. Параметры закона упрочнения взяты, как в работе [217], и проверены при решении задачи идентификации параметров модели *A* для одноосного сжатия (в п.6.3 приводится описание процедуры идентификации для расширенной трехуровневой модели, процедура идентификации двухуровневой модели является ее частным случаем). На рис. 5.2.12 приведены зависимость компоненты тензора напряжений ($-\Sigma_{33}$) на макроуровне (напряжения на макроуровне получаются осреднением напряжений мезоуровня) от компоненты ($-H_{33}$) логарифмической меры деформации при одноосном сжатии (алгоритм реализации соответствующего нагружения содержится в п. 5.1) и зависимость компоненты ($-\Sigma_{23}$) от величины сдвига при простом сдвиге (верификация модели).

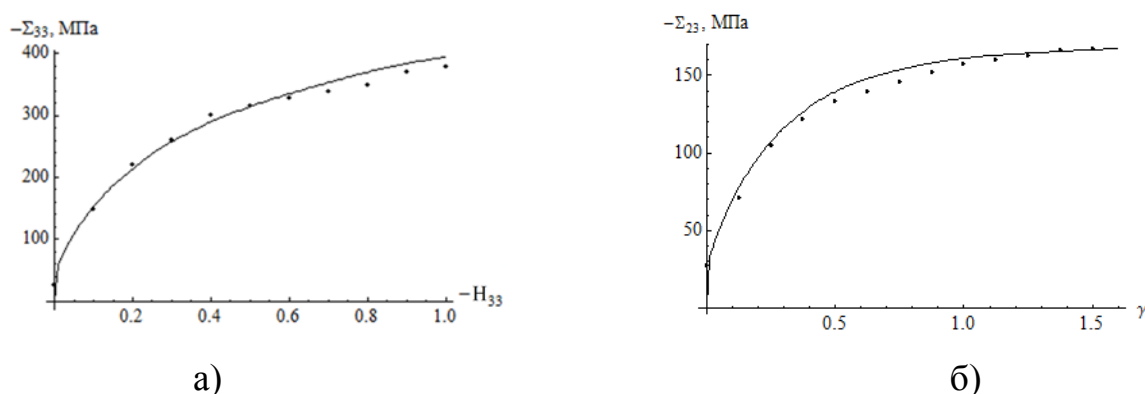


Рис.5.2.12. а) зависимость ($-\Sigma_{33}$) от H_{33} при одноосном сжатии,
 б) зависимость ($-\Sigma_{23}$) от величины сдвига при простом сдвиге

(точки – экспериментальные данные [217], кривая – результаты, получаемые в модели *A*)

Была проведена серия численных расчетов с целью сопоставления получаемых напряжений макроуровня и мезоуровня (для отдельных кристаллитов) при использовании различных рассмотренных в п.4.1 конститутивных моделей мезоуровня для разных кинематических нагружений.

Рассматривалось аффинное деформирование при однородном кинематическом нагружении образца, соответствующего представительному

макрообъему поликристалла – прямоугольного в отсчетной конфигурации параллелепипеда с квадратом в поперечном сечении (с длиной стороны L), расположенным в плоскости OX_1X_2 фиксированной ЛСК. В силу однородности деформирования радиус-вектор материальной точки тела в произвольный момент времени t определяется согласно $\mathbf{r}(t) = \mathbf{f}(t) \cdot \xi^i \mathbf{p}_i$, где $\mathbf{f}(t)$ – градиент деформации, ξ^i – лагранжевы координаты рассматриваемой точки, \mathbf{p}_i – базис неподвижной ЛСК (совпадающий с базисом лагранжевой системы координат в отсчетной конфигурации).

Движение определено градиентом деформации (выбор движения может быть произвольным):

$$\mathbf{f}(t) = 1 / (1 + 6 r_d / h \sin(\omega t)) \mathbf{p}_1 \mathbf{p}_1 + (1 + 6 r_d / h \sin(\omega t)) \mathbf{p}_2 \mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_3 \mathbf{p}_3 + 7 r_d / h (1 + \sin(\omega t / 5) - \cos(\omega t / 3)) \mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2, \quad (5.2.4)$$

где $\omega = 0.001\pi \text{ c}^{-1}$, $r_d / h = 0.1$ – постоянный параметр, деформирование рассматривается на интервале времени $t = [0, 1000] \text{ c}$, для иллюстрации на рис.5.2.13 приведена траектория движения точки тела с лагранжевыми координатами $(0, L, 0)$ м. Нагружение задано с наложением условия изохоричности $I_3(\mathbf{f}(t)) = 1$ с тем, чтобы не наблюдалось доминирования шаровой составляющей тензора напряжений (давления) при больших деформациях, при неизохорических нагружениях характер результатов не меняется (в плане близости напряжений, определяемых в различных моделях).

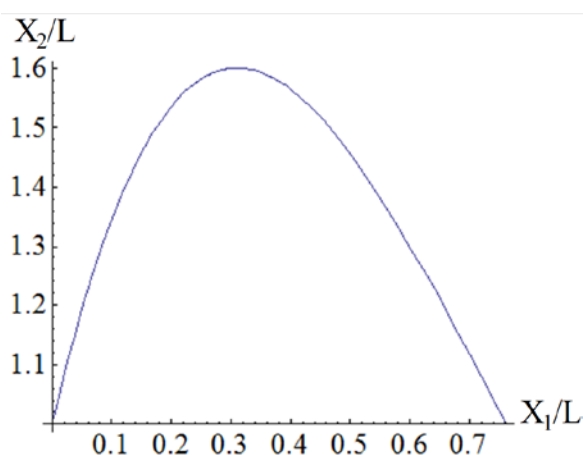


Рис. 5.2.13. Траектория движения точки с лагранжевыми координатами $(0, L, 0)$ м при движении (5.2.4) (в плоскости OX_1X_2); положение точки в начальный момент определяется координатами $X_1/L=0$, $X_2/L=1$, $X_3=0$

На рис.5.2.14 приведены зависимости от времени компонент тензора напряжений Коши на макроуровне (в ЛСК) при использовании модели A мезоуровня (рис. 5.2.14,а) и при использовании модели $B_{скор}$ мезоуровня (рис. 5.2.14,б).

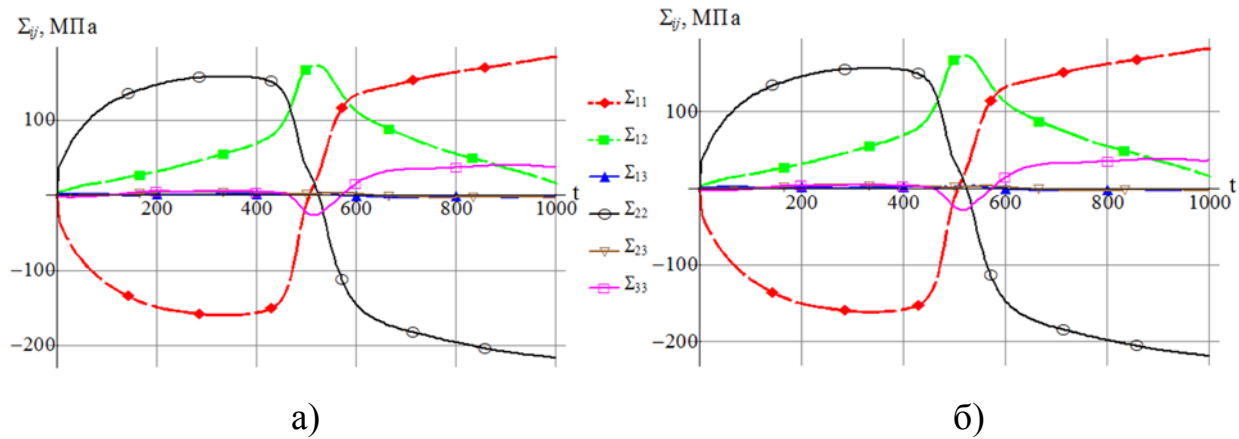


Рис. 5.2.14. Зависимость компонент тензора напряжений Коши Σ на макроуровне (в базисе ЛСК) от времени для ГЦК-поликристалла (а) – при использовании модели A , б) – при использовании модели $B_{скор}$)

Можно отметить близость результатов (графики для изменяющихся компонент макронапряжений визуально практически неотличимы при использовании всех рассматриваемых моделей). Для численной оценки отклонения результатов введем норму:

$$\Delta_G = \max_t |\Sigma_G(t) - \Sigma_A(t)|, \quad (5.2.5)$$

где $|\mathbf{S}| = \sqrt{\mathbf{S}:\mathbf{S}^T}$, $\Sigma_G(t), \Sigma_A(t)$ – изменение макронапряжений, полученное при использовании модели G мезоуровня (одной из вышеприведенных) и модели A мезоуровня.

В таблице 5.2.1 приведены результаты определения отклонения макронапряжений при использовании разных моделей от макронапряжений, получаемых при использовании модели A .

Таблица 5.2.1

Отклонение макронапряжений от получаемых при использовании модели *A*

Модель	<i>A</i>	<i>A_{лин}</i>	<i>A_{скор}</i>	<i>B</i>	<i>B_{скор}</i>
Норма Δ_G (5.2.5), МПа	0	3.516	0	0	3.428
Ее отношение к максимальной в расчете интенсивности напряжений	0	0.996%	0	0	0.971%

(Нулевые отклонения, указанные в этой и нижеприведенных таблицах, обозначают отклонения не выше порядка компьютерной погрешности при работе с действительными числами.)

Результаты таблицы 5.2.1 свидетельствуют о близости осредненных напряжений (макронапряжений), получаемых при использовании различных формулировок моделей мезоуровня, подтверждая корректность вышеприведенных теоретических соображений.

На рис. 5.2.15 для иллюстрации приведены зависимости от времени компонент тензора напряжений мезоуровня для отдельного кристаллита (выбран случайно, начальные ориентации КСК и ПСК совпадают и определяются путем последовательного поворота начально совмещенной с ЛСК кристаллографической системы координат для ГЦК-кристалла вокруг оси Ox^1 на угол $\phi_1 = -1.42$, вокруг оси Ox^2 – на угол $\phi_2 = 3.89$, вокруг оси Ox^3 – на угол $\phi_3 = 2.07$ при использовании модели *A* мезоуровня (рис. 5.2.15,а) и при использовании модели *B_{скор}* мезоуровня (рис. 5.2.15,б).

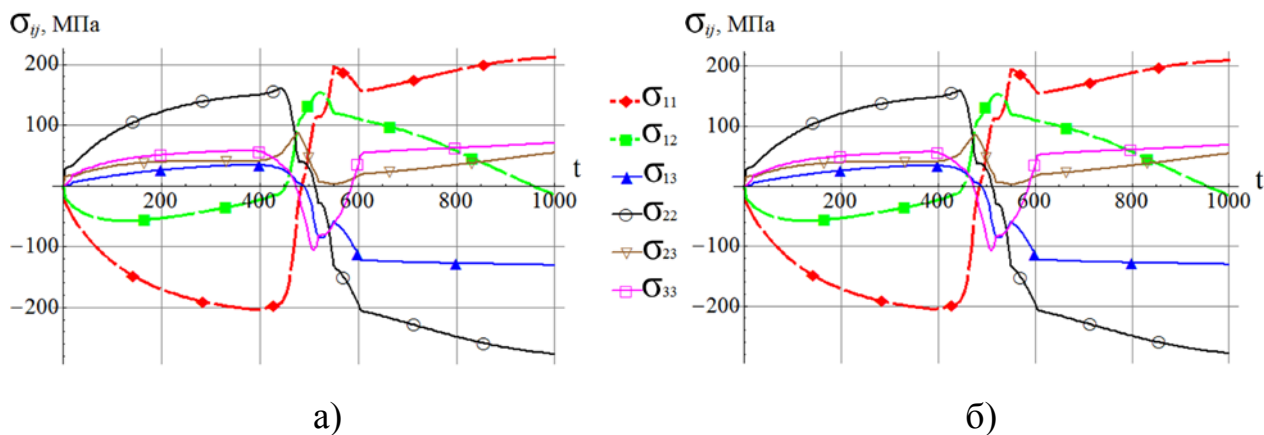


Рис. 5.2.15. Зависимость компонент тензора напряжений Коши мезоуровня для отдельного кристаллита (в ЛСК) от времени
(а) при использовании модели A , б) при использовании модели $B_{\text{скор}}$)

Мезонапряжения для рассмотренного кристаллита близки. Для численной оценки отклонения результатов используем норму, аналогичную (5.2.5):

$$\delta_G = \max_t |\sigma_G(t) - \sigma_A(t)|, \quad (5.2.6)$$

где $|\mathbf{S}| = \sqrt{\mathbf{S}:\mathbf{S}^T}$, $\sigma_G(t)$, $\sigma_A(t)$ – изменение мезонапряжений, полученное при использовании модели G мезоуровня и модели A мезоуровня. В таблице 5.2.2 приведены результаты расчета отклонения мезонапряжений при использовании разных моделей от получаемых при использовании модели A .

Таблица 5.2.2

Отклонение мезонапряжений от получаемых при использовании модели A

Модель	A	$A_{\text{лин}}$	$A_{\text{скор}}$	B	$B_{\text{скор}}$
Норма δ_G (5.2.6), МПа	0	3.661	0	0	7.051
Ее отношение к максимальной в расчете интенсивности напряжений	0	0.731%	0	0	1.409%

Результаты, приведенные на рис.5.2.15 и в табл.5.2.2, свидетельствуют о близости мезонапряжений, что выполняется для подавляющего числа кристаллитов (практически для всех случайных ориентировок). В специальных

случаях отклонения компонент мезонапряжений могут в определенный момент превышать 10 МПа (но не более 23 МПа), что связано с особенностями движения изображающей точки в пространстве напряжений вблизи поверхности текучести [304] при переходах между окрестностями вершин, после переходов напряжения становятся близкими. В силу малости доли таких кристаллитов (38 кристаллитов из 343) напряжения на макромасштабном уровне, получаемые в статистической конститутивной модели при использовании разных моделей мезоуровня, отличаются незначительно (табл.5.2.1). Результаты исследования чувствительности отклика многоуровневых моделей к возмущению параметров и воздействий приведены в п.5.3.

Приведем теперь результаты оценки близости результатов применения различных спинов при описании деформирования монокристаллов и поликристаллов [406]. Моделировался ПО ГЦК-поликристалла, аналогичный использованному при сопоставлении различных моделей мезоуровня, параметры модели описаны выше. На рис.5.2.16 приведены полюсные фигуры после деформирования поликристаллического образца указанным одноосным сжатием и простым сдвигом.

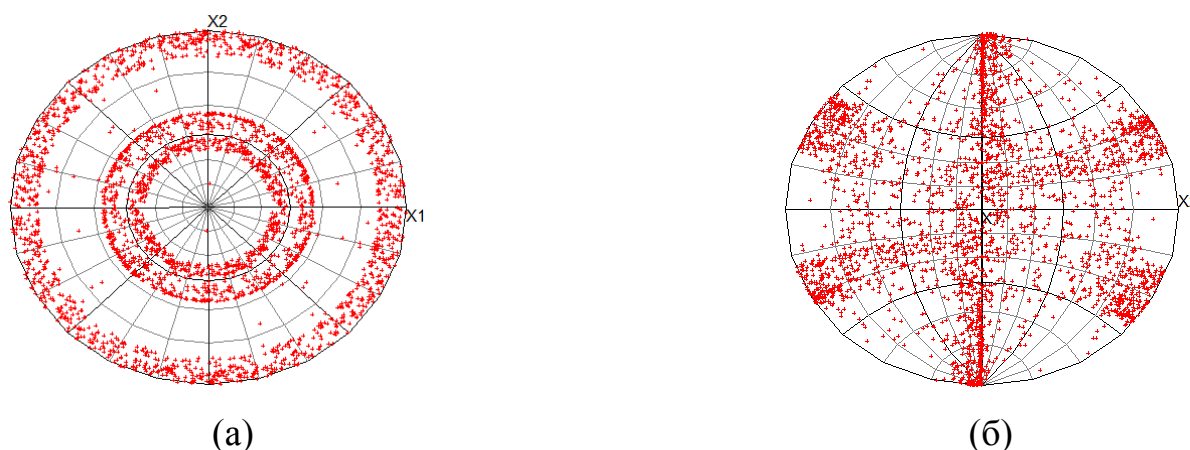


Рис.5.2.16. Полюсные фигуры для направления [111] (проецирование с оси Ox_3 ЛСК): а) после одноосного сжатия до ($H_{33} = -1$), б) после простого сдвига (до $\gamma=1.4$)

Приведенные на рис.5.2.16 полюсные фигуры находятся в хорошем качественном соответствии с экспериментальными данными [183, 217].

Был проведен ряд численных расчетов с целью сопоставления напряжений макроуровня (для поликристалла в целом, получаемых осреднением напряжений мезоуровня) и мезоуровня (для отдельных кристаллитов) при использовании различных рассмотренных выше конститутивных моделей мезоуровня и спинов.

Рассматривалось аффинное деформирование при однородном кинематическом нагружении образца, соответствующего ПО поликристалла. Движение определено градиентом деформации (выбор закона деформирования может быть произвольным):

$$\mathbf{f}(t) = 1 / (1 + 3 r_d / h (\cos(6\omega t / 7) - 1)) \mathbf{p}_1 \mathbf{p}_1 + (1 + 3 r_d / h (\cos(6\omega t / 7) - 1)) \mathbf{p}_2 \mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_3 \mathbf{p}_3 + 2\omega t / 11 \mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2, \quad (5.2.7)$$

где $\omega = 0.001\pi$, $r_d / h = 0.1$ – постоянный параметр, деформирование рассматривается на интервале времени $t = [0, 1000]$ с, для иллюстрации на рис.5.2.17 приведена траектория движения точки тела с лагранжевыми координатами $(0, L, 0)$ м. Использовано нагружение, удовлетворяющее условию изохоричности, $I_3(\mathbf{f}(t)) = 1$, с тем, чтобы не наблюдалось доминирования шаровой составляющей тензора напряжений (давления) при больших деформациях; при неизохорических нагружениях характер результатов не меняется (в смысле близости напряжений, определяемых в различных моделях).

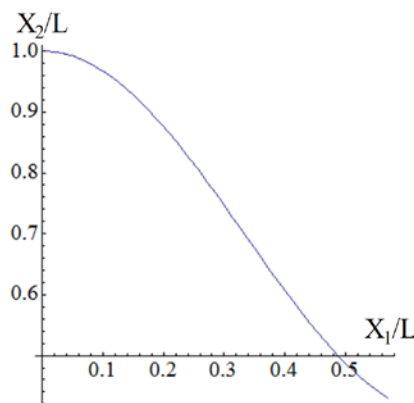


Рис. 5.2.17. Траектория движения точки с лагранжевыми координатами $(0, L, 0)$ м при движении (5.2.7) (в плоскости OX_1X_2), в начальный момент положение точки определяется координатами $X_1/L=0$, $X_2/L=1$, $X_3=0$

На рис.5.2.18 приведены зависимости от времени компонент тензора напряжений Коши на макроуровне (в ЛСК) при использовании модели A

мезоуровня со спином $P1$ и при использовании модели $B_{скор}$ мезоуровня со спином T .

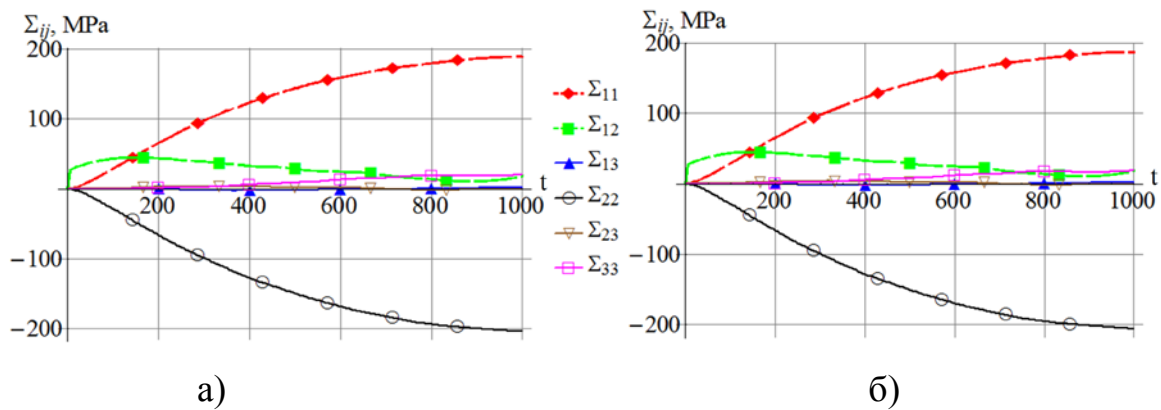


Рис. 5.2.18. Зависимость компонент тензора напряжений Коши на макроуровне (в ЛСК) от времени для ГЦК-поликристалла (а) – при использовании модели A со спином $P1$, б) – при использовании модели $B_{скор}$ со спином T)

Можно отметить близость результатов: графики для изменяющихся компонент макронапряжений визуально неотличимы (например, это наблюдается на рис. 5.2.18) при использовании всех рассматриваемых моделей.

Для численной оценки отклонения результатов введем норму:

$$\Delta_{G/\Omega} = \max_t |\Sigma_{G/\Omega}(t) - \Sigma_{A/P1}(t)|, \quad (5.2.8)$$

где $|\mathbf{S}| = \sqrt{\mathbf{S}:\mathbf{S}^T}$; $\Sigma_{G/\Omega}(t), \Sigma_{A/P1}(t)$ – изменение макронапряжений, полученное при использовании модели G мезоуровня (A или $B_{скор}$) со спином Ω (одного из вышеприведенных) и модели A мезоуровня со спином $P1$. В таблице 5.2.3 приведены результаты определения отклонения напряжений при использовании разных моделей, $\Sigma_{u \max} = 343.62$ МПа – максимальная интенсивность макронапряжений при расчете с применением модели A мезоуровня со спином $P1$.

Таблица 5.2.3

Отклонение макронапряжений от получаемых
при использовании модели A со спином $P1$

\ спин (S)	$P1$	$P2$	$P3$	T	Re
Отклонение $\Delta_{A/S}$, МПа	0	0.1274	0.1051	0.2127	0.2137
$\Delta_{A/S} / \Sigma_{u \max}$	0	0.037%	0.031%	0.0619%	0.0622%
Отклонение $\Delta_{B_{\text{скоп}}/S}$, МПа	3.242	3.222	3.253	3.191	3.172
$\Delta_{B_{\text{скоп}}/S} / \Sigma_{u \max}$	0.944%	0.937%	0.947%	0.929%	0.923%

Результаты в таблице свидетельствуют о близости напряжений, получаемых при использовании различных формулировок моделей мезоуровня, подтверждая корректность приведенных в п.3.2, п.4.1 теоретических выводов.

На рис.5.2.19 приведены компоненты тензора напряжений мезоуровня для отдельного кристаллита (выбран случайным образом, начальные ориентации КСК и ПСК кристаллита совпадают и определяются путем последовательного поворота начально совмещенной с ЛСК кристаллографической системы координат для ГЦК-кристалла вокруг оси Ox^1 на угол $\phi_1 = 2.418$, вокруг оси Ox^2 – на угол $\phi_2 = 0.648$, вокруг оси Ox^3 – на угол $\phi_3 = 3.706$).

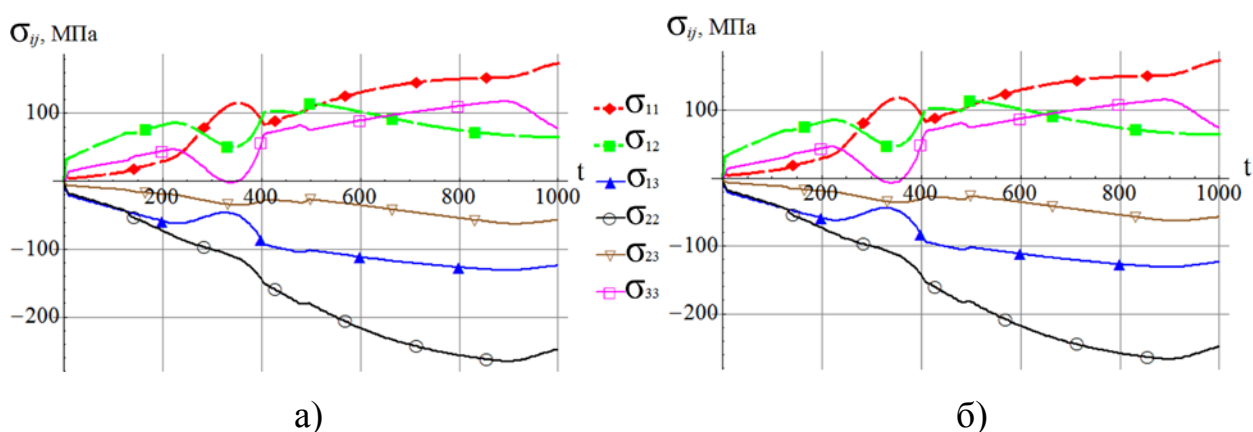


Рис. 5.2.19. Зависимость компонент тензора напряжений Коши мезоуровня для отдельного кристаллита (в ЛСК) от времени (а) – при использовании модели A со спином $P1$, б) – при использовании модели $B_{\text{скоп}}$ со спином T

Мезонапряжения близки для всех моделей (графики визуально не отличимы от приведенных на рис. 5.2.19). Для численной оценки отклонения результатов используем норму, аналогичную (5.2.8):

$$\delta_{G/\Omega} = \max_t |\sigma_{G/\Omega}(t) - \sigma_{A/P1}(t)|, \quad (5.2.9)$$

где $|\mathbf{S}| = \sqrt{\mathbf{S}:\mathbf{S}^T}$; $\sigma_{G/\Omega}(t), \sigma_{A/P1}(t)$ – изменение мезонапряжений, полученное при использовании модели G мезоуровня со спином Ω (одного из вышеприведенных) и модели A мезоуровня со спином $P1$. В таблице 5.2.4 приведены результаты отклонения мезонапряжений при использовании разных моделей, $\sigma_{u \max} = 488.76$ МПа – максимальная интенсивность мезонапряжений для рассматриваемого кристаллита при расчете с применением модели A мезоуровня со спином $P1$.

Таблица 5.2.4

Отклонение мезонапряжений от получаемых при использовании модели A со спином $P1$

\ спин (S)	<i>P1</i>	<i>P2</i>	<i>P3</i>	<i>T</i>	<i>Re</i>
Отклонение $\delta_{A/\Omega}$, МПа	0	2.882	1.349	1.316	1.815
$\delta_{A/\Omega} / \sigma_{u \max}$	0	0.589%	0.276%	0.269%	0.371%
Отклонение $\delta_{B_{vek}/\Omega}$, МПа	12.094	8.986	13.55	12.85	12.92
$\delta_{B_{vek}/\Omega} / \sigma_{u \max}$	2.459%	1.838%	2.774%	2.629%	2.643%

При моделировании ориентировки кристаллитов также получаются близкими. На рис.5.2.20 приведена получаемая для рассматриваемого кристаллита траектория лабораторного направления OX_1 на обратной полюсной фигуре при использовании модели A со спином $P1$ (для других расчетных вариантов рисунок визуально неотличим).

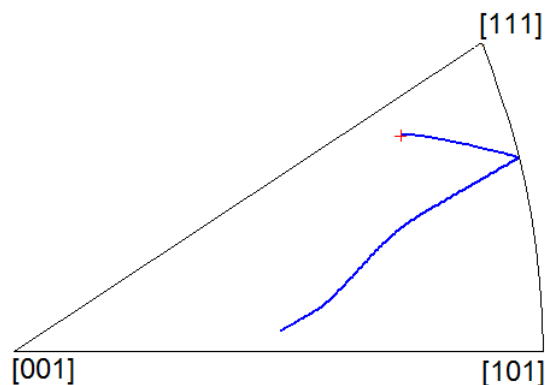


Рис.5.2.20. Движение направления OX_1 на обратной полюсной фигуре при деформировании, полученное при использовании модели A со спином $P1$, крестом отмечено конечное положение

Для оценки различия получаемых при моделировании изменения ориентировок кристаллита введем норму:

$$q_{G/S} = \max_t |\mathbf{q}_{G/S}(t) - \mathbf{q}_{A/P1}(t)|, \quad (5.2.10)$$

где $|\mathbf{q}| = \sqrt{\mathbf{q}_x^2 + \mathbf{q}_y^2 + \mathbf{q}_z^2 + \mathbf{q}_w^2}$; $\mathbf{q}_{G/S}(t), \mathbf{q}_{A/P1}(t)$ – кватернионы, определяющие ориентировку кристаллита в момент t (поворот ЛСК в ПСК), полученные при использовании модели G (либо A , либо $B_{скоп}$) со спином S (одного из вышеприведенных) и модели A со спином $P1$.

В таблице 5.2.5 приведены результаты определения отклонения напряжений при использовании разных моделей.

Таблица 5.2.5

Отклонение ориентировок от получаемых при использовании модели A со спином $P1$

\ спин	$P1$	$P2$	$P3$	T	Re
Отклонение $q_{A/S}$, МПа	0	0.00226	0.00183	0.00269	0.00184
Отклонение $q_{B_{скоп}/S}$, МПа	0.00293	0.00185	0.0026	0.00293	0.00214

Характер результатов, приведенных в табл.5.2.4 и 5.2.5, свидетельствующий о близости получаемых мезонапряжений и ориентировок, присущ подавляющему числу кристаллитов (т.е. практически для всех случайных ориентировок). В

специальных случаях отклонения компонент мезонапряжений могут в определенный момент превышать 15 МПа, что связано с особенностями движения изображающей точки в пространстве напряжений вблизи поверхности текучести при переходах между окрестностями вершин, но после переходов напряжения становятся близкими. Кроме того, в силу малой доли таких кристаллитов (13 кристаллитов из 343) напряжения на макромасштабном уровне, получаемые в статистической конститутивной модели при использовании разных моделей мезоуровня, отличаются незначительно (табл.5.2.3).

Таким образом, можно заключить, что приведенные в п.3.2 и п.4.1 аналитические выкладки, показывающие эквивалентность или близость (в плане определяемых при одинаковых кинематических воздействиях напряжений) рассмотренных формулировок (упругих ОС и спинов решетки), подтверждаются результатами численных расчетов, проведенных для произвольно выбранных кинематических нагружений. При этом формулировка с использованием разложения движения с явным выделением движения ПСК позволяет теоретически обоснованно перейти (п.4.1) к близкой формулировке в скоростной форме в актуальной конфигурации, предпочтительной для численного решения краевых задач с изменяющимися контактными условиями, необходимого при моделировании технологических процессов ТМО. Поэтому в качестве базовой модели мезоуровня в постановке п.4.2 рассматривается именно формулировка $V_{скор}$; далее приводятся результаты, полученные при использовании этой модели с указанными выше параметрами (при этом для всех вариантов расчетов осуществлена проверка, подтверждающая, что при использовании других моделей мезоуровня получаются близкие результаты). Отметим, что скоростная формулировка в актуальной конфигурации удобней и для построения расширенных моделей, включающих описание большего числа физических механизмов деформирования, например, зернограничного скольжения (гл.6).

Моделирование деформирования поликристаллических образцов

Рассмотрим результаты исследования деформирования образцов поликристаллической меди (ГЦК-поликристалл) при некоторых простых

нагрузениях. ПО макроуровня при моделировании содержит 1000 зерен, начальные ориентации которых были распределены по равномерному закону [427]. На рис.5.2.21 приведены прямые полюсные фигуры для начальной конфигурации, здесь и далее построенные с учетом соответствия площади на полюсной фигуре площади на сфере (equal-area projection) [183], т.е. с использованием равновеликой проекции Ламберта [61].

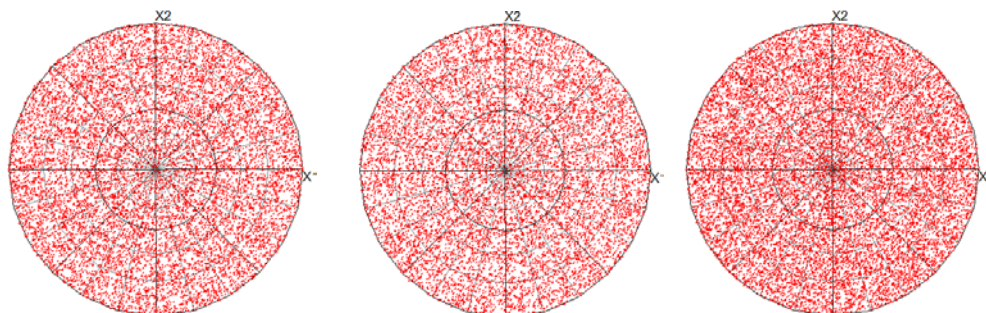


Рис. 5.2.21. Полюсные фигуры образцов поликристаллической меди для $\{111\}$, $\{100\}$, $\{110\}$ в начальной конфигурации

На рис. 5.2.22 приведена зависимость компоненты (в базисе ЛСК) тензора напряжений ($-\Sigma_{33}$) на макроуровне от компоненты ($-H_{33}$) логарифмической меры деформации при сжатии вдоль оси OX_3 .

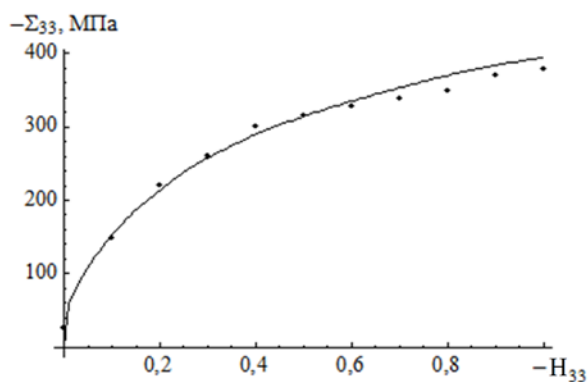


Рис. 5.2.22. Зависимость ($-\Sigma_{33}$) от H_{33} при сжатии (точки – экспериментальные данные [217])

Отметим, что одноосное напряженное состояние наблюдается только на макроуровне, напряжения в отдельных кристаллитах не являются одноосными (рис.5.2.23). Для всех кристаллитов доминирует компонента σ_{33} , однако и остальные компоненты нетривиальны, при этом на рис. 5.2.23 видны переходы

изображающей точки в пространстве напряжений между окрестностями вершин поверхности текучести (ее характеристика дана в п.2.2).

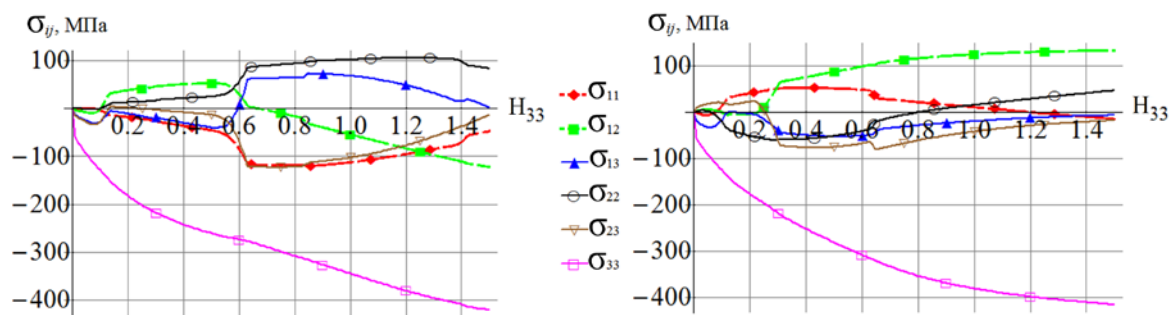


Рис. 5.2.23. Зависимости компонент тензора мезонапряжений (в базисе ЛСК) от H_{33} при сжатии для случайно выбранных кристаллитов

На рис. 5.2.24 приведены полюсные фигуры для момента $H_{33} = -1$. Видно, что модель позволяет описывать классическую «текстуру прокатки» [18] для ГЦК-поликристаллов с высокой энергией дефекта упаковки, симметричную относительно оси сжатия (отметим, что для ГЦК-поликристаллов с низкой энергией дефекта упаковки процесс текстурообразования протекает по-другому – вследствие того, что в таких материалах важным является механизм двойникования [411]). Полученные полюсные фигуры находятся в хорошем качественном соответствии с экспериментальными данными [183, 217].

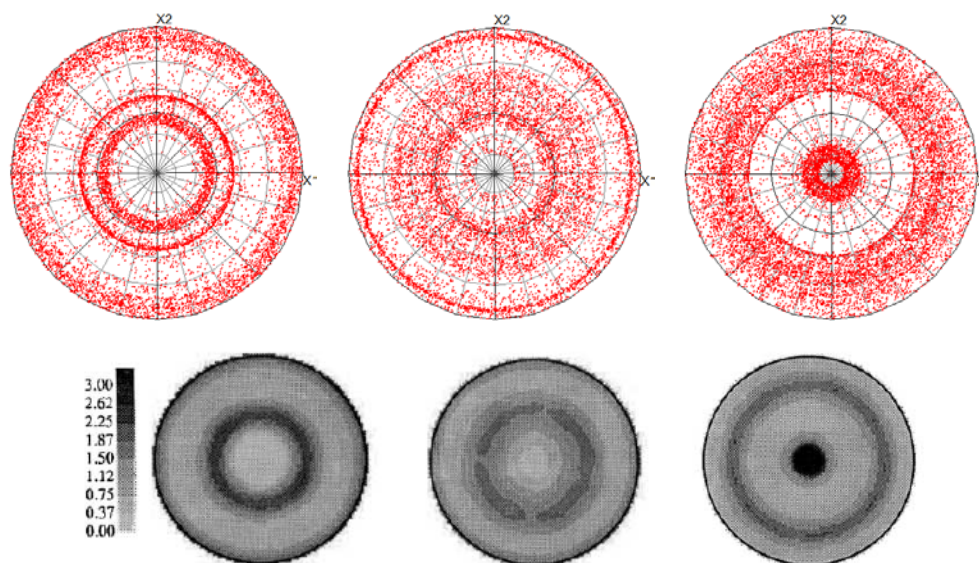


Рис. 5.2.24. Полюсные фигуры для $\{111\}$, $\{100\}$, $\{110\}$ после сжатия до $H_{33} = -1$ (проецирование с оси Ox_3 ЛСК), снизу – опытные данные [183]

Результаты моделирования растяжения поликристаллического образца приведены на рис. 5.2.25, 5.2.26.

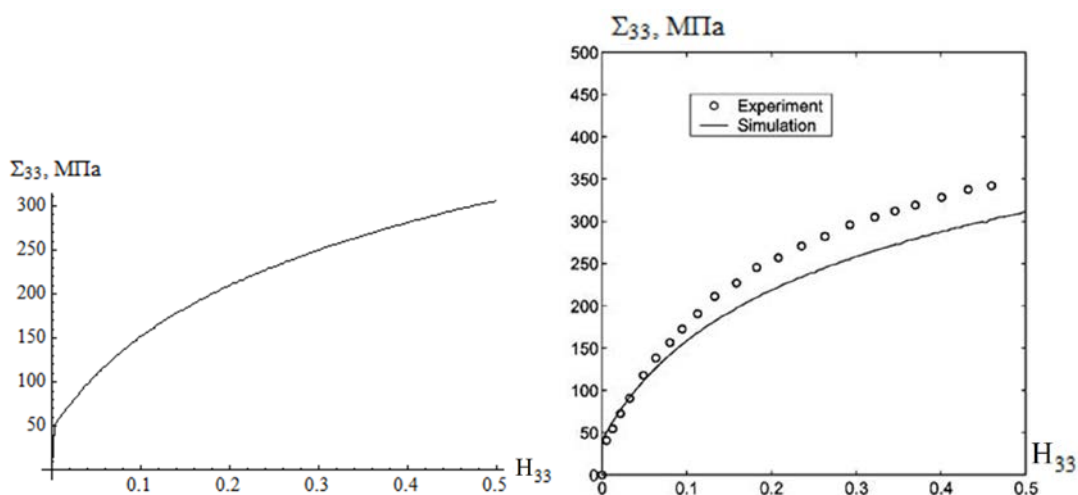


Рис. 5.2.25. Зависимость Σ_{33} от H_{33} при растяжении, слева – полученная в расчетах, справа – экспериментальные и результаты расчетов [183]

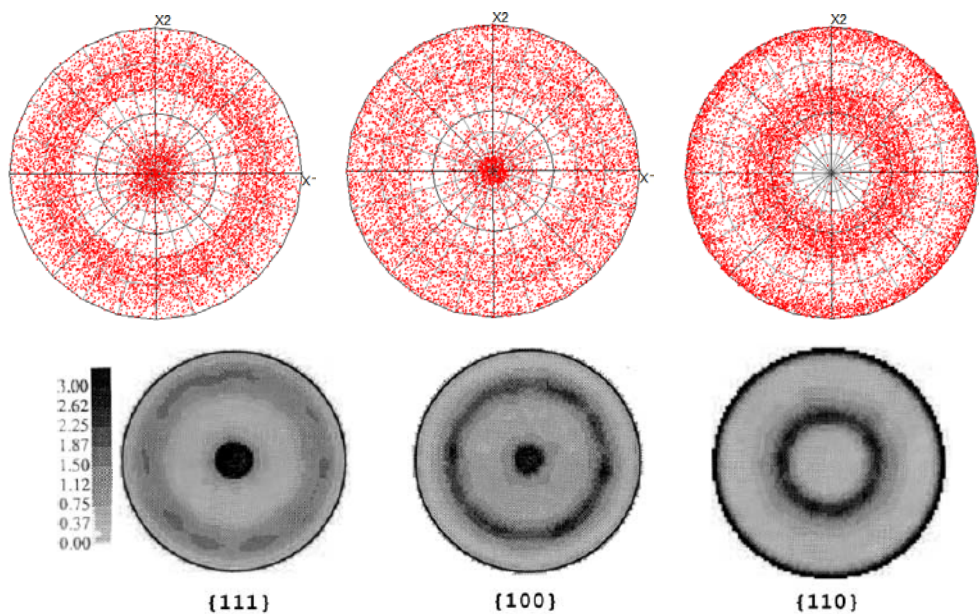


Рис. 5.2.26. Полюсные фигуры для {111}, {100}, {110} после растяжения до $H_{33} = 0.37$ (проецирование с оси Ox_3 ЛСК), снизу – опытные данные [183]

Для моделирования простого сдвига (кинематическое нагружение задано транспонированным градиентом места $\mathbf{f}(t) = \mathbf{F}(t) = \mathbf{E} - \gamma \mathbf{p}_2 \mathbf{p}_3 = \mathbf{E} - \dot{\epsilon} t \mathbf{p}_2 \mathbf{p}_3$, где $\dot{\epsilon} = 0.0017 \text{ c}^{-1}$) зависимость компоненты ($-\Sigma_{23}$) от величины сдвига приведена на рис. 5.2.27.

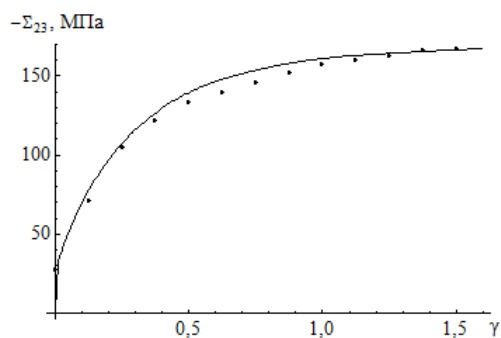


Рис. 5.2.27. Зависимость $(-\Sigma_{23})$ от величины сдвига при простом сдвиге (точки – экспериментальные данные [217])

Прямые полюсные фигуры для момента $\gamma=1.4$ приведены на рис. 5.2.28.

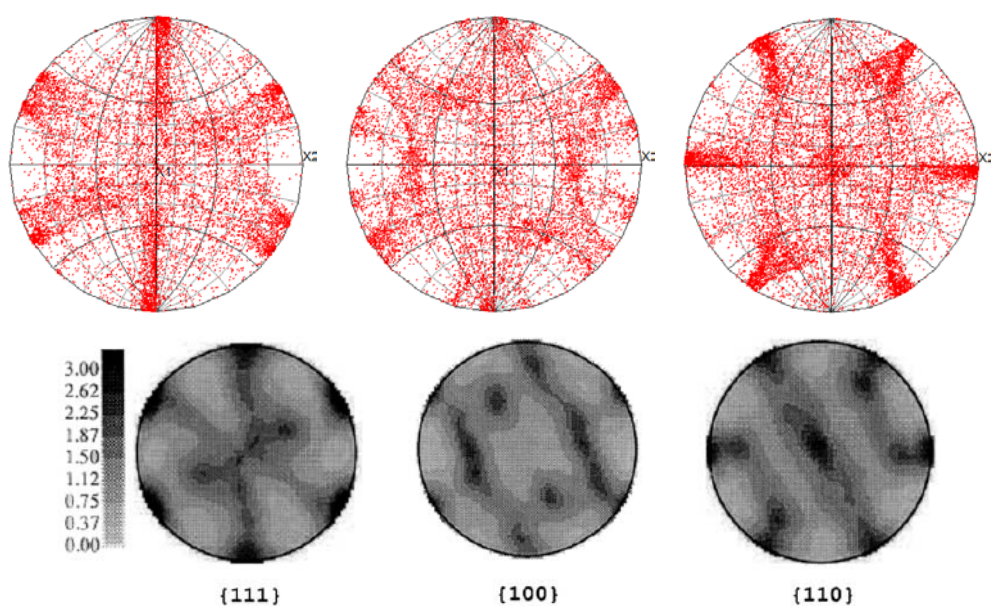


Рис. 5.2.28. Прямые полюсные фигуры после простого сдвига ($\gamma=1.4$) для $\{111\}$, $\{100\}$, $\{110\}$ (проецирование с оси OX_1 ЛСК), снизу – опытные данные [183]

Отметим, что хотя используемые при расчете параметры были определены в [217] при идентификации по данным процесса сжатия, полученные напряжения и полюсные фигуры для растяжения и простого сдвига находятся в удовлетворительном соответствии с экспериментальными данными [183, 217].

С использованием предложенной модели можно исследовать как процессы произвольного простого (например, простой сдвиг в другом направлении относительно ЛСК [430]), так и процессы произвольного сложного нагружения. Для примера приведем результаты моделирования кинематического нагружения

по двухэтапным траекториям вида «простой сдвиг – простой сдвиг» с постоянными градиентами скоростей деформации [171]:

на этапе I

$$\mathbf{L}_I = (\hat{\nabla} \mathbf{V}^T)_I = 5 \times 10^{-4} (\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2 \mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_2 \mathbf{p}_1) \text{ с}^{-1},$$

на этапе II

$$\mathbf{L}_{II} = (\hat{\nabla} \mathbf{V}^T)_{II} = 5 \times 10^{-4} (\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_1 - \cos^2 \psi \mathbf{p}_2 \mathbf{p}_2 - \sin^2 \psi \mathbf{p}_3 \mathbf{p}_3 + \cos \psi (\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_2 \mathbf{p}_1) + \sin \psi (\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_3 - \mathbf{p}_3 \mathbf{p}_1) - \cos \psi \sin \psi (\mathbf{p}_2 \mathbf{p}_3 + \mathbf{p}_3 \mathbf{p}_2)) \text{ с}^{-1}, \quad (5.2.11)$$

где параметр ψ – угол поворота перед вторым этапом (нагружение на этапах близко к реализуемому в центре заготовки в процессе равноканального углового прессования [329]). Каждый из этапов имел длительность 1000 с.

На рис.5.2.29 демонстрируются полученные с помощью модели для нагружения (5.2.11) зависимости компонент тензора напряжений Коши на макроуровне (для поликристалла) от времени при $\psi = 45^\circ$ и $\psi = 90^\circ$. Данные свидетельствуют о приобретении материалом после этапа I анизотропии пластических свойств.

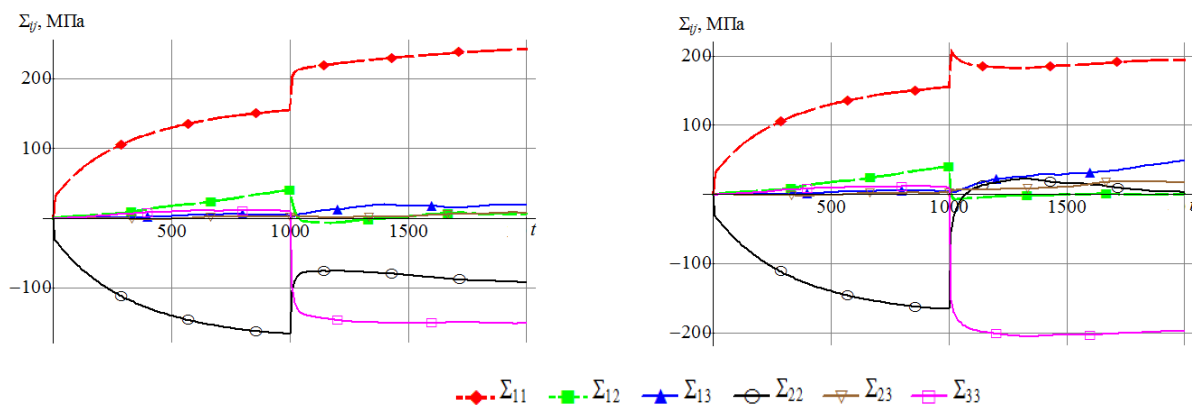


Рис. 5.2.29. Зависимость от времени компонент тензора напряжений Коши σ на макроуровне в ЛСК для ГЦК-поликристалла при разном значении угла ψ : слева – при $\psi = 45^\circ$, справа – при $\psi = 90^\circ$

На рис. 5.2.30 приведены прямые полюсные фигуры для поликристаллического агрегата в различных конфигурациях. Наблюдается возникновение значительной неоднородности распределения ориентаций кристаллитов, что отражается в появлении анизотропии упругих свойств материала на макромасштабном уровне.

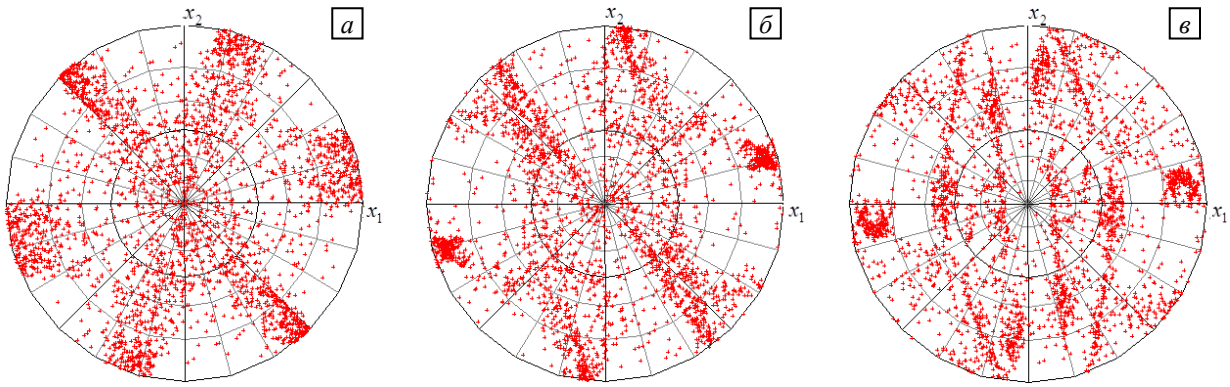


Рис. 5.2.30. Прямые полюсные фигуры для направлений $\langle 111 \rangle$ (проецирование вдоль \mathbf{p}_3): конечная конфигурации этапа I (а), конечная конфигурация этапа II при $\psi = 45^\circ$ (б) и $\psi = 90^\circ$ (в)

К сожалению, известные автору эксперименты на сложное нагружение тонкостенных трубчатых образцов ограничены малыми полными деформациями (на сдвиг – не более 5 – 7%) [1, 14, 15, 30 и др.]. Между тем многоуровневые модели, откалиброванные на имеющихся экспериментальных данных, можно использовать для численных экспериментов с произвольным нагружением и анализа выполнения на макроуровне известных положений макрофеноменологических теорий (например, постулата изотропии А.А.Ильюшина [33]), что осуществлено в работах коллег автора [133, 134].

5.3. Исследование чувствительности многоуровневых моделей к возмущению параметров и воздействий

Один из способов исследования «качества» математических моделей заключается в оценке их чувствительности к параметрам [122, 396, 397], под которыми в широком смысле понимаются материальные функции и константы, включенные в определяющие уравнения (оператор) модели, начальные условия и входные данные (параметры воздействия). Чувствительностью называется зависимость изменения выходных данных, получаемых по модели, от вариации ее параметров.

Чувствительность нелинейных математических моделей анализируется в различных областях: популяционной динамике [7], агроэкологии [151], химии [88]

и других. В МДТТ для исследования чувствительности моделей (в большинстве случаев — конструкций) к изменениям воздействий, геометрических параметров или параметров материала часто применяется конечно-элементная схема, с использованием которой в явном виде находятся производные отклика по параметрам [153, 271, 298, 300]. При этом в качестве отклика наряду с напряжениями может рассматриваться некоторая целевая функция, характеризующая, например, запас прочности или стоимость конструкции [153]. Таким способом можно провести исследование чувствительности прямых конститутивных моделей поликристаллов, включающих решение краевой задачи на мезомасштабном уровне (п.1.3), а также моделей конструкций с использованием статистических конститутивных моделей поликристаллических материалов (постановка приведена в п.4.2).

Между тем важной представляется и задача оценки чувствительности собственно статистических конститутивных моделей поликристаллов к возмущениям воздействий и параметров модели (что связано с погрешностями их измерения и отклонениями параметров технологических процессов от номинальных) [171]. Актуальность ее решения обусловлена стохастическим характером свойств материала — для обоснования возможности избежать необходимости проведения для каждого конкретного изделия точной экспериментальной идентификации свойств материала применяемые в технологических расчетах математические модели материалов должны быть устойчивы по отношению к изменению свойств: небольшие отклонения во входных параметрах должны приводить к малым отклонениям отклика. Стоит отметить, что анализ устойчивости полезен при проведении процедуры идентификации [376, 456] при разработке новых моделей материалов: если для установленных из физических соображений диапазонов изменения параметров наблюдается существенная чувствительность модели, то ужесточается требование к точности экспериментов и их стабильной повторяемости.

Произвольную математическую модель можно формально задать как оператор, связывающий входные (X) и выходные (Y) параметры (конкретные параметры рассматриваемых многоуровневых моделей описываются ниже):

$$\mathbf{Y} = \mathbf{F}(\mathbf{X}). \quad (5.3.1)$$

Локальная чувствительность модели A_{X_i} [122, 396] к изменению любого параметра X_i ($i=1, \dots, I$, где I — общее число входных параметров) характеризуется разностью откликов, рассчитанных с использованием невозмущенного X_i и возмущенного $X_i^* = X_i + \delta X_i^*$ значений, отнесенной к возмущению δX_i^* [396]:

$$A_{X_i} = \left\| \mathbf{F}(\mathbf{X}|_{X_i + \delta X_i^*}) - \mathbf{F}(\mathbf{X}|_{X_i}) \right\| / \|\delta X_i^*\|.$$

Для сопоставления устойчивости по отношению к различным параметрам в определение локальной чувствительности целесообразно внести нормирование:

$$A_{X_i} = \left(\frac{\left\| \mathbf{F}(\mathbf{X}|_{X_i + \delta X_i^*}) - \mathbf{F}(\mathbf{X}|_{X_i}) \right\|}{\left\| \mathbf{F}(\mathbf{X}|_{X_i}) \right\|} \right) / \left(\frac{\|\delta X_i^*\|}{\|X_i\|} \right). \quad (5.3.2)$$

Отметим, что в [396] предлагается его альтернативный вариант:

$$A_{X_i} = \left(\frac{\left\| \mathbf{F}(\mathbf{X}|_{X_i + \delta X_i^*}) - \mathbf{F}(\mathbf{X}|_{X_i}) \right\|}{\left\| \mathbf{F}(\mathbf{X}|_{X_i + D(\delta X_i^*)}) \right\|} \right) / \left(\frac{\|\delta X_i^*\|}{\|D(\delta X_i^*)\|} \right), \quad (5.3.3)$$

где $D(\delta X_i^*)$ — дисперсия используемого закона распределения параметра δX_i^* при нулевом математическом ожидании, при этом в [396] принято $X_i = 0$. При малых относительно X_i возмущениях δX_i^* , что характерно для рассматриваемых конститутивных моделей, формула (5.3.2) близка к обобщению (5.3.3) на случай $\|X_i\| > 0$.

Таким образом, задача оценки (локальной) чувствительности к возмущению параметра сводится к определению оценки (5.3.2). Для численного моделирования необходимо генерировать возмущения параметра методом Монте–Карло и проводить статистическую оценку распределения отклонений отклика и чувствительности по (5.3.2) при различных законах распределения параметров.

Входными данными \mathbf{X} в (5.3.1) для обсуждаемых многоуровневых моделей являются приведенные в постановке (п.4.2) параметры, характеризующие свойства материала, кинематические воздействия, начальные условия — распределение

ориентировок кристаллитов, остаточные напряжения и накопленные сдвиги, имеющиеся в материале перед началом деформирования. Следует заметить, что параметры, характеризующие свойства материала, представляют собой действительные числа (определены в евклидовом пространстве над полем действительных чисел), для тензорзначных величин под ними понимаются компоненты тензоров.

При представлении двухуровневой модели в форме (5.3.1) в качестве оператора отклика \mathbf{F} принимается совокупность истории изменения макронапряжений и ориентировок кристаллитов в представительном макрообъеме для всех рассматриваемых нагружений (отметим, что в общем случае это понятие можно расширить путем включения в него и других характеристик макроуровня, например, упругих и пластических свойств) [171]:

$$\mathbf{F}(\mathbf{X}) = \{F(\mathbf{X})^{(1)}, F(\mathbf{X})^{(2)}, \dots, F(\mathbf{X})^{(L)}\}, \quad (5.3.4)$$

$$F(\mathbf{X})^{(l)} = \left\{ \Sigma(t) \Big|_{t \in [0, T]}, \mathbf{q}^{(i)}(t) \Big|_{t \in [0, T]}, i = 1, \dots, N \right\}, l = 1, \dots, L,$$

где $\mathbf{q}^{(i)}$ — нормированный кватернион ориентации ПСК i -го кристаллита, соответствующий тензору ориентации $\mathbf{o}^{(i)}$, N — число кристаллитов в ПО макроуровня, T — время окончания процесса, L — число рассматриваемых нагружений, истории изменений $\Sigma(t)$, $\mathbf{q}^{(i)}(t)$ для каждого вида нагружения (теста) получены при использовании в модели набора параметров \mathbf{X} . Отметим, что количество тестов и их виды могут быть установлены, исходя из информации о наиболее характерных нагружениях, присущих конкретным технологическим процессам. Для числа L рассматриваемых нагружений отклик (5.3.4) представляет собой траекторию в пространстве, определяемом как декартово произведение из L одинаковых пространств. Каждое из них, в свою очередь, является декартовым произведением двух пространств. Первое представляет собой декартово произведение трехмерных евклидовых пространств (в нем определен тензор макронапряжений), второе — декартово произведение N пространств кватернионов поворотов трехмерного евклидова пространства (в нем определены ориентировки N кристаллитов).

Норму оператора введем следующим образом (по Чебышеву):

$$\|\mathbf{F}(\mathbf{X})\| = \max_{l=1, \dots, L} \|\mathbf{F}(\mathbf{X})^{(l)}\| = \max_{l=1, \dots, L} \left(\max_{t \in [0, T]} |\boldsymbol{\Sigma}(t)^{(l)}| / \Sigma_{\text{хар}} + \max_{t \in [0, T]} |\mathbf{q}(t)^{(l)}| \right), \quad (5.3.5)$$

где $\Sigma_{\text{хар}}$ — характерное напряжение, обеспечивающее «равноправие» слагаемых.

В проведенных расчетах принято: $\Sigma_{\text{хар}} = 100$ МПа; $|\boldsymbol{\Sigma}| = \sqrt{\Sigma_{ij} \Sigma_{ij}}$; $|\mathbf{q}| = \sqrt{q_i q_i}$.

Для отыскания значения (5.3.3) запишем выражение для отклонения отклика

$$\mathbf{F}(\mathbf{X}|_{X_i + \delta X_i^*}) - \mathbf{F}(\mathbf{X}|_{X_i}) = \left\{ \left(\mathbf{F}(\mathbf{X}|_{X_i + \delta X_i^*}) - \mathbf{F}(\mathbf{X}|_{X_i}) \right)^{(1)}, \dots, \left(\mathbf{F}(\mathbf{X}|_{X_i + \delta X_i^*}) - \mathbf{F}(\mathbf{X}|_{X_i}) \right)^{(L)} \right\},$$

$$\left(\mathbf{F}(\mathbf{X}|_{X_i + \delta X_i^*}) - \mathbf{F}(\mathbf{X}|_{X_i}) \right)^{(l)} = \left\{ \begin{array}{l} \boldsymbol{\Sigma}(t)|_{t \in [0, T]}|_{X_i + \delta X_i^*} - \boldsymbol{\Sigma}(t)|_{t \in [0, T]}|_{X_i}, \\ \mathbf{q}^{(i)}(t)|_{t \in [0, T]}|_{X_i + \delta X_i^*} - \mathbf{q}^{(i)}(t)|_{t \in [0, T]}|_{X_i}, i = 1, \dots, N \end{array} \right\}, l = 1, \dots, L,$$

норма которого имеет вид:

$$\begin{aligned} \left\| \mathbf{F}(\mathbf{X}|_{X_i + \delta X_i^*}) - \mathbf{F}(\mathbf{X}|_{X_i}) \right\| &= \max_{l=1, \dots, L} \left\| \left(\mathbf{F}(\mathbf{X}|_{X_i + \delta X_i^*}) - \mathbf{F}(\mathbf{X}|_{X_i}) \right)^{(l)} \right\| = \\ &= \max_{load=1, \dots, Load} \left(\begin{array}{l} \max_{t \in [0, T]} \left| \boldsymbol{\Sigma}(t)|_{t \in [0, T]}|_{X_i + \delta X_i^*} - \boldsymbol{\Sigma}(t)|_{t \in [0, T]}|_{X_i} \right| / \Sigma_{\text{хар}} + \\ + \max_{t \in [0, T]} \left| \mathbf{q}^{(i)}(t)|_{t \in [0, T]}|_{X_i + \delta X_i^*} - \mathbf{q}^{(i)}(t)|_{t \in [0, T]}|_{X_i} \right| \end{array} \right). \end{aligned}$$

Представленная методика позволяет оценить воздействие возмущений параметров на получаемый в модели отклик. При этом принимается во внимание вся история изменения отклика, а не только его значение в конкретный момент времени. В такой ситуации требуются значительные вычислительные ресурсы, поэтому на данном этапе не рассматривалось перекрестное влияние параметров, то есть приведенные оценки локальны по отношению к многообразию взаимодействий параметров. Для проведения глобального анализа чувствительности [122, 396] необходимо учитывать все возможные отклонения всех допустимых параметров и находить дисперсии отклонений отклика от значения, отвечающего их фиксированным величинам. Общее количество вычислительных экспериментов получится чрезвычайно большим, что с учетом принятого выше толкования отклика потребует огромных вычислительных затрат.

В качестве иллюстрирующего расширение методики примера ниже приведена оценка устойчивости модели к совместному возмущению двух параметров.

Поскольку упругие модули кристаллитов определяются в многочисленных экспериментах достаточно точно, они исключены из числа варьируемых параметров. Возмущения задавались по равномерному закону распределения отдельно для каждого параметра с несколькими диапазонами изменения в пределах 1–5% от его номинального значения, приведенного выше. Для нанесения каждой точки на каждый нижеприведенный график (для значения отклонения аргумента на 1, 2, 3, 4, 5%) использовались числовые данные 40 реализаций возмущенных параметров при принятии соответствующей ПО макроуровня выборки из 343 кристаллитов, начальные ориентации которых распределены случайно по равномерному закону. В качестве нагрузений (для каждой реализации) рассматривались приведенные в п.5.2 одноосное сжатие, простой сдвиг, двухэтапные траектории «простой сдвиг – простой сдвиг» (5.2.11) с $\psi = 45^\circ$ и $\psi = 90^\circ$. Отметим, что в п.5.2 приведены результаты для выборки из 1000 кристаллитов, однако достаточной является выборка из меньшего числа зерен, поскольку значения макронапряжений (средних мезонапряжений) и вид полюсной фигуры перестают зависеть от числа кристаллитов, когда оно больше 200 (подтверждено результатами проведенных вычислительных экспериментов).

Для базовой модели рассматривалась чувствительность к шести характеристикам: параметрам вязкопластического соотношения $\dot{\gamma}_0$ (обозначен далее как параметр X_1) и m (обозначен как X_2); параметрам закона упрочнения h_0 (X_3); τ_{sat} (X_4); a (X_5); начальным значениям критических напряжений для всех систем скольжения τ_{c0} (X_6).

На рис.5.3.1 показаны характеристики определенного в расчетах распределения нормы разности откликов модели со случайными возмущенными и невозмущенными параметрами, отнесенной к норме последнего (на рис. 5.3.1 и далее $M(\cdot)$ и $S(\cdot)$ – полученная численная оценка, соответственно, математического ожидания и среднеквадратичного отклонения) [171].

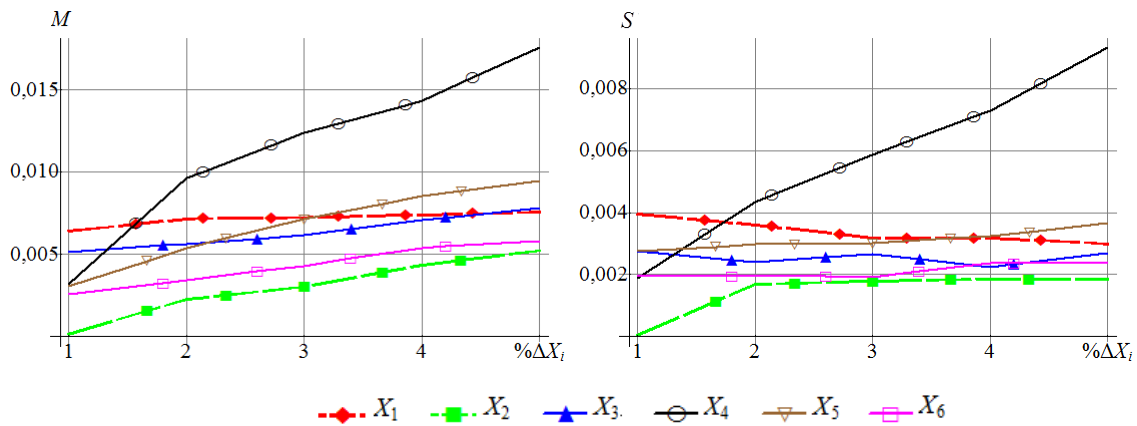


Рис. 5.3.1. Статистические оценки в зависимости от диапазона отклонений параметра, полученные с использованием двухуровневой модели:
слева – для среднего значения по реализациям

$$M = M \left(\left(\left\| \mathbf{F}(\mathbf{X}|_{X_i+\delta X_i^*}) - \mathbf{F}(\mathbf{X}|_{X_i}) \right\| \right) / \left\| \mathbf{F}(\mathbf{X}|_{X_i}) \right\| \right), \text{ справа – для}$$

$$\text{среднеквадратичного отклонения } S = S \left(\left(\left\| \mathbf{F}(\mathbf{X}|_{X_i+\delta X_i^*}) - \mathbf{F}(\mathbf{X}|_{X_i}) \right\| \right) / \left\| \mathbf{F}(\mathbf{X}|_{X_i}) \right\| \right)$$

Результаты (рис.5.3.1) свидетельствуют об устойчивости базовой двухуровневой модели к возмущениям выбранных параметров: малые отклонения воздействий на них приводят к малым отклонениям отклика (при возмущении параметров в пределах 5% отклонение отклика не превышает 3,34% для X_4 , 1,8% — для остальных параметров). Наибольшее влияние на выходные данные оказывает отклонение параметра $\tau_{\text{sat}}(X_4)$, характеризующего критическое напряжение внутризеренных сдвигов «при насыщении»; этот эффект обусловлен тем, что максимальные (хотя и небольшие) отличия напряжений и ориентировок в большинстве случаев наблюдаются в финале процесса деформирования, когда касательные напряжения по системам скольжения управляются, в первую очередь, значением τ_{sat} .

На рис. 5.3.2 приведены результаты оценки чувствительности модели как относительного изменения отклика к относительному изменению параметров согласно (5.3.2).

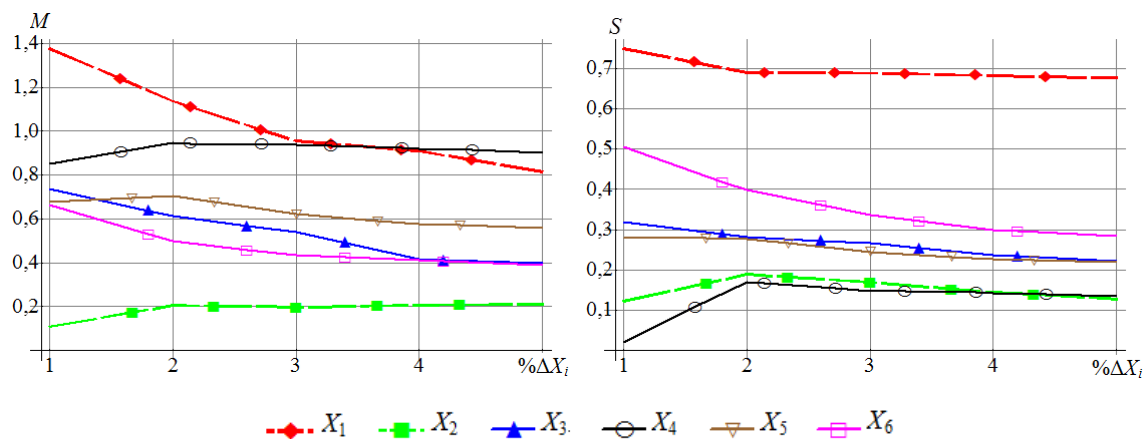


Рис. 5.3.2. Статистические оценки чувствительности A_{X_i} (5.3.2) для двухуровневой модели в зависимости от диапазона отклонений параметров: слева – $M = M(A_{X_i})$, справа – $S = S(A_{X_i})$

По данным рис. 5.3.2 модель показывает наибольшую чувствительность к параметрам τ_{sat} (X_4) и характерной скорости сдвигов $\dot{\gamma}_0$ (X_1), наименьшую — к скоростной чувствительности m (X_2), при 1%-ном диапазоне отклонения этого параметра X_2 оценки отклонения отклика (рис.5.3.1): $M = 1,61 \cdot 10^{-4}$, $S = 5,7 \cdot 10^{-5}$. Последнее обусловлено тем, что при довольно большом номинальном значении $m = 83.33$ изображающие точки в пространстве напряжений для кристаллитов находятся в окрестности поверхности текучести [170]; малые отклонения m от номинального значения почти не влияют на расстояние от поверхности текучести.

Таким образом, чувствительность модели ко всем параметрам можно признать низкой, что, вероятно, связано с общим характером изменения напряжений при деформировании — во-первых, зависимость интенсивности напряжений от накопленной деформации (результаты в п.5.2) можно аппроксимировать степенной функцией с показателем степени, меньшим 1, во-вторых, модель существенно нелинейна, и потому мало чувствительна к изменению отдельного параметра. Некоторое понижение $M(A_{X_i})$ и $S(A_{X_i})$ для отдельных параметров при увеличении диапазона отклонения связано с тем, что при рассмотрении расширенных диапазонов изменения параметра, наряду с появлением реализаций с более заметным отклонением отклика от отклика для невозмущенных параметров, также возрастает и число реализаций с откликом,

который близок к отклику для невозмущенных параметров. Это обусловлено, в частности, стремлением изображающих точек в пространстве напряжений для кристаллитов находиться в окрестности поверхности текучести, и изменение параметров (кроме X_4 , определяющего финальную поверхность текучести) после некоторого их увеличения уже не может значительно влиять на изменение отклика.

Рис. 5.3.3 содержит характеристики полученного в расчетах распределения нормы разности отклика модели со случайными возмущенными параметрами и отклика с невозмущенными параметрами, отнесенной к норме последнего, а рис. 5.3.4 – статистические оценки чувствительности модели к возмущению параметров m (X_2) и τ_{c0} (X_6) как совместно, так и по отдельности (результаты для последних идентичны приведенным на рис. 5.3.1, 5.3.2). Под относительным отклонением « $\% \Delta X$ » понимается оценка при совместном $\sqrt{(\Delta X_2/X_2)^2 + (\Delta X_6/X_6)^2}$ и раздельном $|\Delta X_i|/|X_i|$, \sum_i , возмущении параметров, где i — номер варьируемого параметра, X_i — его номинальная величина, ΔX_i — отклонение значения параметра в рассматриваемой реализации от своей номинальной величины.

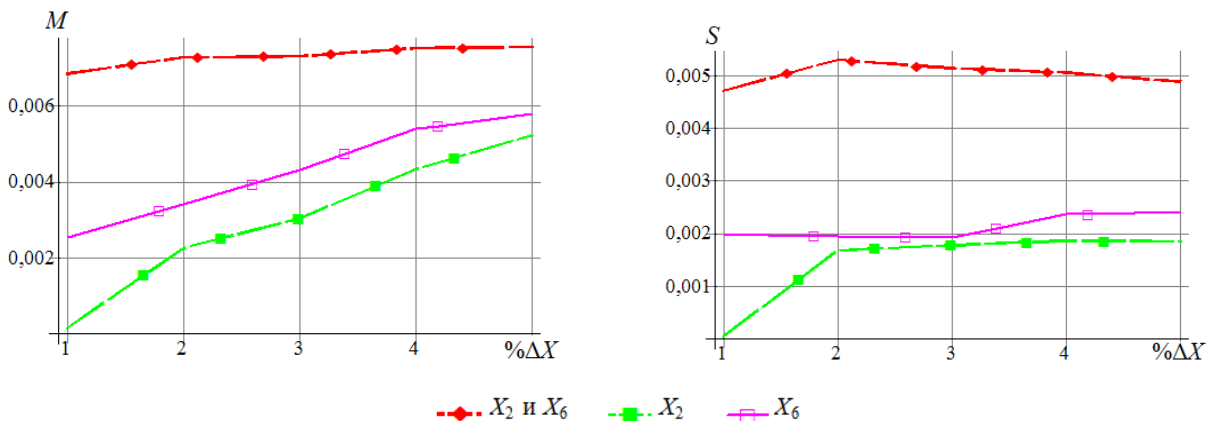


Рис. 5.3.3. Статистические оценки в зависимости от диапазона отклонений параметра/параметров, полученные с использованием двухуровневой модели:

$$\text{слева} - M = M \left(\left(\left\| \mathbf{F}(\mathbf{X}|_{X_i+\delta X_i^*}) - \mathbf{F}(\mathbf{X}|_{X_i}) \right\| \right) / \left\| \mathbf{F}(\mathbf{X}|_{X_i}) \right\| \right),$$

$$\text{справа} - S = S \left(\left(\left\| \mathbf{F}(\mathbf{X}|_{X_i+\delta X_i^*}) - \mathbf{F}(\mathbf{X}|_{X_i}) \right\| \right) / \left\| \mathbf{F}(\mathbf{X}|_{X_i}) \right\| \right)$$

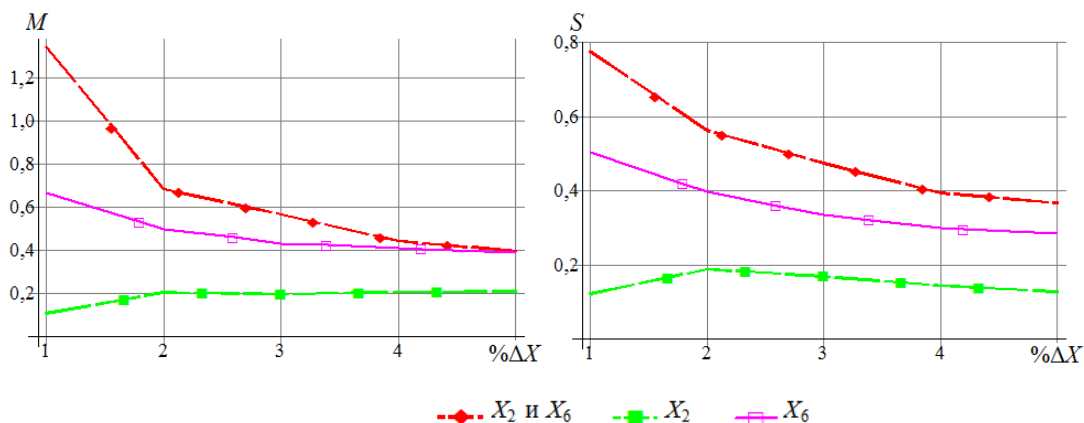


Рис. 5.3.4. Статистические оценки чувствительности A_{X_i} (5.3.2) для двухуровневой модели в зависимости от диапазона отклонений параметров: слева – $M = M(A_{X_i})$, справа – $S = S(A_{X_i})$

По результатам на рис. 5.3.3, 5.3.4 можно заключить, что совместное варьирование параметров оказывает более заметное влияние на отклик, что связано с существенной нелинейностью математической модели, но при этом отклонение отклика от полученного при номинальных значениях параметров остается малым (при их возмущении в пределах 5% отклонение отклика не превышает 1,5%).

Таким образом, результаты вычислений свидетельствуют об устойчивости двухуровневой конститутивной модели по отношению к изменению ее параметров. Это подтверждает перспективность приложения многоуровневых моделей материалов к исследованию технологических процессов ТМО, поскольку исключается необходимость проведения для каждого частного случая точной экспериментальной идентификации свойств материала конкретного изделия. На основе выполненного анализа осуществлено ранжирование параметров моделей по степени чувствительности к их возмущениям.

Приведенные в данной главе результаты свидетельствуют о возможностях разработанных двухуровневых моделей: адекватно описывается НДС на макроуровне и изменение структуры материала, наблюдается устойчивость к по отношению к возмущению параметров. Показано, что известные формулировки

дают близкие результаты, однако именно использование разработанного подхода (глава 3) позволяет осуществить физически обоснованную постановку в актуальной конфигурации, что предпочтительно для решения краевых задач.

6. Трехуровневая модель с возможностью описания режима структурной сверхпластичности и переходов между режимами деформирования

В п.6.1 приводится обзор экспериментальных исследований сверхпластического деформирования [161], а также существующих моделей сверхпластичности [140]. Предложенная трехуровневая конститутивная модель [140], включающая описание ключевых механизмов и изменения структуры как при «обычном» неупругом, так и при сверхпластическом деформировании, приведена в п.6.2. Характеристика процедуры идентификации параметров модели, установленные в ходе нее значения параметров, анализ результатов верификации [140] и моделирования различных нагружений представлены в п.6.3.

6.1. Анализ результатов экспериментальных исследований и существующих моделей для описания сверхпластического деформирования

Об экспериментальных исследованиях сверхпластичности

При определенных температурно-скоростных условиях и состоянии зеренной структуры поликристаллические металлы и сплавы способны испытывать неупругие деформации, на порядки превосходящие предельные деформации при «обычной» пластичности. В МДТТ принято данное свойство материалов называть «сверхпластичностью». Отметим, что из-за существенной зависимости протекания процесса от скорости деформирования (времени) это свойство этимологически более соответствует «сверхползучести», тем не менее далее будет использоваться введенный первооткрывателями явления термин.

Интенсивное изучение явления сверхпластичности (СП) осуществлялось в 20 веке. В монографии [16] отмечается, что первые упоминания о СП можно встретить в работах Г.Д. Бенгаха [200]: при растяжении образца из латуни при температуре 700°C была достигнута относительная деформация 163%. Впоследствии СП различных материалов экспериментально исследовали В.Розенгейн, К.Дженкинс, К. Пирсон и др. [16]. Важным результатом было

обнаружение в ходе микроструктурных исследований отсутствия полос сдвига внутри зерен и неизменности среднего размера зерен в ходе деформации. А.А. Бочвар и З.А. Свидерская получили большие относительные удлинения на сплавах алюминия с цинком (цинкаль) и, насколько известно автору, впервые ввели термин «сверхпластичность» [9].

Под СП в современной трактовке понимается способность материала «деформироваться в процессе одноосного растяжения без образования шейки до больших относительных удлинений при относительно низких напряжениях течения» [16]. В случае существенной зависимости удлинений от структуры материала СП стали называть структурной СП. Альтернативно СП-деформирование может осуществляться за счет фазовых превращений полиморфных металлов и сплавов (например, железа, сталей, титана и некоторых сплавов на его основе и т.д.) [16], возможность реализации такой трансформационной СП слабо зависит от состояния зеренной структуры. Структурная СП является более перспективной при использовании в технологических процессах, чем трансформационная [56], так как может быть реализована почти во всех сплавах в определенных температурно-скоростных диапазонах испытания и при соответствующей подготовке их структуры [16]. В настоящей работе рассматривается только структурная СП (далее под аббревиатурой «СП» будет пониматься именно структурная СП).

Преимуществами технологий с СП являются [16, 21, 39, 104, 150, 158 и др.]: возможность изготовления крупногабаритных деталей без сварных швов, снижение числа операций, уменьшение расхода материала, проведение процесса формовки при малых усилиях (а следовательно – с меньшим износом инструментов), получение изделий с гладкой поверхностью при минимальных отклонениях от требуемой геометрии, в частности, с выполнением жестких ограничений по разнотолщинности. Применяются и комплексные технологии, например, включающие сварку и СП формовку для получения многослойных пустотелых конструкций [65, 79, 150, 174 и др.]. Для совершенствования существующих и разработки новых технологических процессов одним из эффективных «инструментов» выступает математическое моделирование,

важнейшим элементом которого являются конститутивные модели материалов (ОС), способные адекватно описывать физические процессы, наблюдаемые при деформировании. Процедуры идентификации и верификации моделей материалов, включающих описание СП, осуществляются на экспериментальных данных, получаемых обычно на макрообразцах, подвергаемых одноосному растяжению (далее используется сокращение «СПД-испытание»).

К сегодняшнему дню накоплена значительная база информации об исследованиях структурной СП различных металлических сплавов в натуральных испытаниях [16, 79 и др.]. Основными особенностями режима СП деформирования, отмечаемыми в публикациях о результатах экспериментальных исследований (проведенный с участием автора обзор представлен в [161]), являются:

- существенно более высокие (по сравнению с обычным режимом деформирования) показатели относительного удлинения без локализации деформации (без образования шейки),
- заметно пониженное напряжение течения (по сравнению с обычным режимом деформирования),
- высокая чувствительность напряжения течения к скорости деформации,
- мелкозернистая структура материала, сохраняющаяся при деформировании (зерна остаются той же формы),
- активная смена соседствующих кристаллитов.

Структурная СП наблюдается как в многокомпонентных близких к однофазным металлических сплавах, так и в двухфазных сплавах. Первый тип материалов можно охарактеризовать как ограниченные твердые растворы с матричной структурой из металла основной фазы с распределенными частицами интерметаллидных фаз внедрения внутри зерен и по их границам, причем доля неосновных компонентов-металлов – не более 10%. Однако важно отметить значимую роль внедренных частиц, в первую очередь – в ограничении роста зерен для обеспечения стабилизации зеренной структуры для реализации СП. Стабильность зеренной структуры двухфазных сплавов обусловлена также ограничением роста зерен, но за счет другой фазы.

Обычно для СПД-испытаний и для СП-технологий заготовки подготавливаются [39] методами интенсивной пластической деформации (ИПД) – равноканальным угловым прессованием и экструзией, кручением под высоким давлением [12, 119] – при следующих режимах: 1) холодной или теплой деформацией (ориентировочно до 0.4 гомологических температур) и осуществляемого, как правило, последующего рекристаллизационного отжига [377, 457 и др.]; 2) деформированием при высоких температурах (более 0.5 гомологических, например, [201, 238, 358, 415 и др.]). Мелкозернистая структура при использовании первого способа образуется преимущественно за счет процессов фрагментации и дробления (финальной стадии фрагментации) [115] при деформировании, существенно значим и процесс статической рекристаллизации при последующем отжиге [377]. При втором способе мелкозернистая структура образуется в основном в результате динамической рекристаллизации [39, 358, 415 и др.]. В монографии [39] отмечается ограниченность применения первой схемы при подготовке материала для технологических процессов, так как перед отжигом необходимо реализовать большие деформации, осуществление чего при невысоких температурах обычно невыгодно ввиду больших энергозатрат и быстрого износа обрабатывающих инструментов, поэтому подготовка структуры материала по второй схеме используется более часто. Важной задачей является моделирование процесса предварительной подготовки материала к СП деформированию, что позволяет выбирать параметры технологического процесса (температуру, механические воздействия) для достижения оптимального для СП фазового и структурного состояния в материале. Поскольку для решения этой задачи требуются модели материалов, включающие описание изменения структуры, наиболее перспективным представляется использование многоуровневого подхода. Отметим, что задачи разработки подмоделей для описания измельчения зеренной структуры и рекристаллизации являются весьма сложными, их решением занимаются многие коллективы, включая тот, в который входит автор; указанные задачи находятся за рамками настоящей работы (для описания рекристаллизации при СПД-испытании экспериментальная информация об изменении зеренной структуры закладывается в модель напрямую – п.6.2), но в

перспективе все соответствующие разработки будут объединены в единый комплекс конститутивных моделей материалов, предназначенный для описания полного цикла технологических процессов ТМО. Подробное описание состояния начальной структуры образцов из различных материалов приводится в [161].

На этапе концептуальной постановки задачи разработки математической модели материала [3] необходимо систематизировать данные о результатах экспериментальных исследований для формирования, по возможности, полной картины о физических механизмах СП и происходящих изменениях структуры материала при переходе к деформированию в этом режиме в одноосных испытаниях. Результаты анализа, проведенного автором совместно с научным консультантом П.В. Трусковым и коллегой Э.Р. Шарифуллиной, отражены в статье [161].

Во всех найденных публикациях (в [161] цитируется 139 работ) представлены результаты, полученные при испытаниях образцов на растяжение при различных исходных условиях по структуре материала, температуре и скорости деформирования. Для многих сплавов наблюдается стадийность зависимости напряжения от деформации в ходе СПД испытания, обусловленная изменением ролей различных механизмов деформирования и их взаимодействием в процессе деформирования. На рис. 6.1.1 в качестве примера приведены зависимости напряжения от деформации при одноосном растяжении (вдоль оси Ox_3 фиксированной ЛСК) для некоторого диапазона постоянных скоростей движения захвата [201]. Подобные зависимости представлены в [22, 254, 293, 348, 395 и др.] – для близких к однофазным алюминиевых сплавов, в [246, 442 и др.] – для магниевых сплавов, в [283, 362, 453 и др.] – для двухфазных сплавов на основе цинка и меди, в [302, 400 и др.] – для титановых сплавов. В публикациях отмечается отсутствие шеек (выраженной зоны локализации деформации), поэтому можно использовать необходимое при экспериментальном исследовании НДС материала предположение об однородности деформации образца [16, 30, 33, 103].

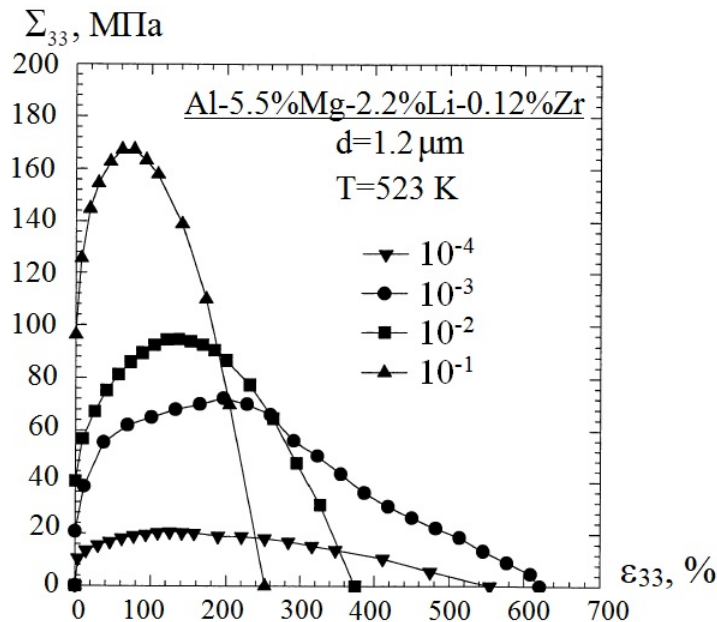


Рис. 6.1.1. Изменение продольных напряжений Σ_{33} при увеличении относительного удлинения ϵ_{33} в испытаниях при различных скоростях (линейной) деформации для алюминиевого сплава 1420 (Al-5.5%Mg-2.2%Li-0.12%Zr) (начальный размер зерна составляет 1.2 мкм, гомологическая температура постоянна и равна 0.56) [201]

Обратим внимание на то, что постоянной в испытаниях была линейная скорость деформации, когда скорость удлинения относится к начальной длине образца. Очевидно, что соответствующая компонента D_{33} тензора деформации скорости (скорость удлинения относится к текущей длине) будет убывать со временем (п.6.3).

«Сценарий» работы механизмов деформирования при испытании на одноосное растяжение с выходом в режим СП

На основе консолидации информации из большинства рассмотренных публикаций в [161] предложен следующий «сценарий» деформирования во время испытания с выходом в режим СП. При этом предполагается, что температурно-скоростные условия находятся в необходимом диапазоне (в частности, температура испытания – не более 0.7 гомологической, это позволяет не

рассматривать непрерывную динамическую рекристаллизацию, происходящую при больших температурах [461]).

Представительный макрообъем поликристаллического материала, соответствующий однородному макрообразцу в начальном (перед испытанием) состоянии представляет собой совокупность зерен, находящихся в двух состояниях: зерна близкой к шаровой формы с малой плотностью дефектов, которые образованы в ходе динамической рекристаллизации при предварительной обработке методами ИПД, и зерна с высокой плотностью дефектов с формой как близкой к сферической, так и вытянутой. Во всех найденных литературных источниках данные для СПД-испытаний приводятся для такой структуры; причиной ее «недоведения» в процессе предварительной обработки методами ИПД до полностью рекристаллизованного состояния, видимо, является то, что при продолжении обработки (например, применением добавочных проходов равноканального углового прессования) происходят неблагоприятные для СП свойств трансформации в зеренной и граничной структуре материала. В частности, для близких к однофазным сплавам последние могут быть связаны с изменением числа внедренных частиц и их перераспределением в материале, для двухфазных сплавов – с избыточным измельчением зерен одной из фаз. Отметим, что этот вопрос обозначает важность моделирования процессов предварительной обработки ИПД с анализом изменения структуры материала, о чем упоминается выше.

На начальном 1-м этапе деформирования при СПД-испытании (восходящая ветвь на кривой растяжения, рис.6.1.1) наблюдается повышение напряжения течения и преобладают механизмы внутризеренного дислокационного скольжения (ВДС) и ротаций зерен (наблюдается развитие кристаллографической текстуры), зернограничное скольжение (ЗГС) незначительно.

На переходной 2-й стадии кривая растяжения постепенно изгибается и наблюдается монотонное снижение напряжения течения (рис.6.1.1). При этом все существенней становится роль ЗГС, поскольку границы к этому моменту оказываются более подготовленными к его реализации за счет происходящих на 1 и 2 стадии аккомодационных процессов – выглаживания посредством

зернограницной диффузии и повышения энергии в результате притока решеточных дислокаций.

В зависимости от исходных температурно-скоростных условий испытания и структуры материала или на 1-м и 2-м этапах, или только на 2-м реализуется динамическая рекристаллизация (отметим, что авторы экспериментов указывают на то, что статическая рекристаллизация в образцах при температурах из рассматриваемого диапазона не происходит). Предполагается, что основная роль рекристаллизации заключается в завершении подготовки структуры материала к режиму структурной СП. Исходно рекристаллизованные зерна растут за счет начально нерекристаллизованной фазы, вследствие чего происходит и снижение средней плотности дислокаций в материале. При деформировании происходят ротации зерен, активация ЗГС (его интенсивность возрастает на 2-й стадии) вызывает смену соседствующих зерен, поэтому рекристаллизованные зерна регулярно контактируют с нерекристаллизованными кристаллитами. Вероятность (в среднем) роста рекристаллизованного зерна в некотором направлении пропорциональна площади соответствующей границы, поэтому для удлиненных за счет ВДС на 1-м этапе зерен рост происходит преимущественно в перпендикулярном к оси удлинения направлении, обуславливая возврат формы к шаровой к концу 2-го этапа. В итоге после 2-й переходной стадии создается полностью рекристаллизованная малодефектная близкая к равноосной зеренная структура. Отметим, что выдвинутые предположения о ходе рекристаллизации основаны на определенных литературных данных могут быть модифицированы в соответствии с результатами реализации натуральных экспериментов, например, «дорекристаллизация» может проходить уже на завершающей стадии при реализации СП (в этом случае указанное выше свойство для реализации СПД – сохранения зеренной структуры, – будет обеспечиваться приблизительно).

Режим структурной СП реализуется на 3-й завершающей стадии с постепенным снижением (рис.6.1.1) напряжения течения; подчеркнем, что в рассмотренных публикациях приведены именно истинные напряжения. Этот режим деформирования можно охарактеризовать следующими признаками:

– преобладание ЗГС с активной сменой соседних зерен и с обязательным действием аккомодационных механизмов – ВДС и зернограничной диффузии, ротациями;

– стабильность равноосной мелкозернистой структуры (зерна практически не изменяют свою форму), обусловленная одновременной реализацией ВДС и ротаций зерен (зерна в каждый момент времени стремятся менять форму вследствие ВДС, но из-за постоянных поворотов интегральная деформация зерна является близкой к нулевой);

– ЗГС способствует ослаблению или рассеиванию текстуры, сформированной после 1-й стадии испытания.

Прекращение режима структурной СП происходит, если ЗГС перестает быть преобладающим механизмом. Это может осуществляться как по геометрическим причинам (существенное утонение образца, когда в объеме материала не остается возможности осуществления ЗГС без разрыва образца), так и при выходе температуры и скорости деформации из требуемых для режима структурной СП диапазонов. Последнее может произойти и из-за методики проведения самого эксперимента, который обычно проводится с постоянной скоростью движения захватов, т.е. со снижением скорости деформации (п.6.3).

Таким образом, сложный сценарий реализации деформирования характерен даже для одноосного (на макроуровне) СП испытания: работают и взаимодействуют несколько механизмов, меняются их роли, значительно эволюционирует (зеренная и дефектная) структура материала. Подобная ситуация (смена режимов деформирования, ролей механизмов и эволюция структуры) будет характерна и для основанных на СП технологий, так как температурно-скоростные условия в различных частях обрабатываемого изделия могут существенно отличаться. В связи с этим весьма актуальным является построение математических моделей материалов, способных учитывать и описывать указанные факторы.

Модели для описания сверхпластического деформирования

Для описания СП деформирования можно выделить следующие подходы, позволяющие формулировать ОС: 1) макрофеноменологический, 2) структурно-механический, 3) термодинамический, 4) физический (общая информация о подходах к построению ОС в МДТТ приведена в п.1.1). Отметим, что некоторые модели построены с использованием элементов нескольких подходов (в данном случае модель можно условно отнести к классу с преобладающими признаками). Первые три подхода являются наиболее широко применяемыми.

Описания различных теорий в рамках макрофеноменологического и структурно-механического подходов приведены во многих монографиях – М.Х.Шоршорова [173, 174], М.В.Грабского [21], И.И. Новикова, В.К. Портного [86], О.А. Кайбышева [39], Р.А. Васина, Ф.У. Еникеева [16], Р.Р. Мулюкова и коллег [79], А.И. Рудского, Я.И. Рудаева [113] и др., а также в многочисленных статьях.

Подавляющее большинство макрофеноменологических моделей базируется на одномерном соотношении, связывающем напряжение σ с деформацией ε и со скоростью деформации $\dot{\varepsilon}$:

$$\sigma = K\varepsilon^n\dot{\varepsilon}^m, \quad (6.1.1)$$

где n – показатель деформационного упрочнения, m – параметр скоростной чувствительности (напряжения σ к скорости деформирования $\dot{\varepsilon}$), K – параметр, зависящий в общем случае от температуры, размера зерна, механизмов деформирования и других микроструктурных характеристик материала. Соотношение типа (6.1.1) применяется при создании моделей СП для диапазона умеренных температур, при которых преобладающим является вклад неупругой составляющей в полную деформацию. В ранних моделях СПД описывалось как течение нелинейно вязкой жидкости, в таком случае соотношение (6.1.1) упрощается:

$$\sigma = K\dot{\varepsilon}^m. \quad (6.1.2)$$

Соотношение (6.1.2) часто применяется для описания СПД при высоких температурах, при которых основные механизмы деформирования – ЗГС и

диффузионная ползучесть, а ВДС играет преимущественно аккомодационную роль. Однако, как отмечено в [222] и показано в приведенном выше обзоре результатов экспериментальных исследований СПД [161], отсутствие деформационного упрочнения возможно только в сплавах со стабильной микроструктурой (например, только для 3-й стадии одноосного испытания).

Соотношения (6.1.1) или (6.1.2) имеют ограниченную область применимости (для конкретного материала с определенной исходной структурой, при определенном виде нагружения и диапазоне температурно-скоростных воздействий и т.д.), представляя собой некоторую аппроксимацию механических свойств. Традиционным в исследованиях СП является определение в экспериментах скоростной чувствительности – показателя степени m в соотношениях (6.1.1) или (6.1.2). На рис. 6.1.2 приведена характерная зависимость напряжения течения σ , относительного удлинения δ и параметра m скоростной чувствительности от скорости деформации [16].

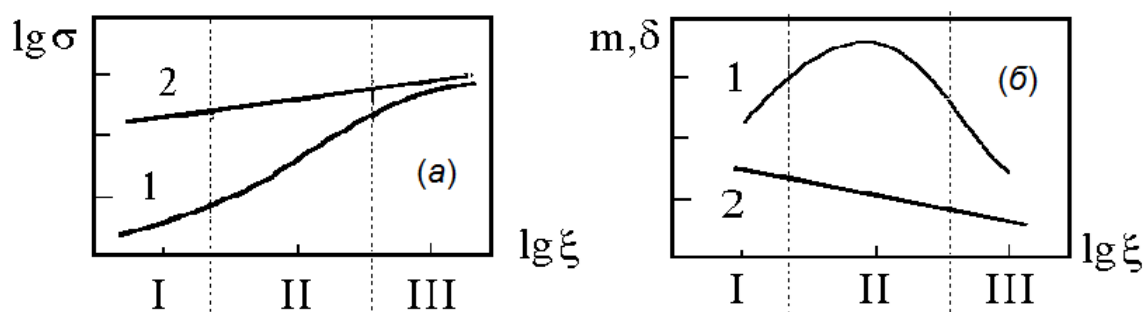


Рис. 6.1.2. Характерные зависимости напряжения течения σ (а), относительного удлинения δ и параметра скоростной чувствительности m (б) от скорости деформации ξ сплавов в СП (обозначено 1) и обычном (2) состояниях [16].

I, II, III – так называемые стадии СП течения [39]

График зависимости скоростной чувствительности m от скорости деформации для СП на рис. 6.1.2 принято называть «сигмоидальной кривой СП». В работах по исследованию СП устоялся термин «стадия СП» [16, 39]. Отметим отличие этого понятия от применяемого выше и далее при рассмотрении одноосного испытания (где под стадией понимался этап процесса нагружения) здесь по стадией понимается интервал значений, к которому принадлежит

скорость деформации. Поскольку основной особенностью СП является повышенная чувствительность к скорости деформации, можно сказать, что СП-режим в указанном выше смысле реализуется на второй стадии (рис.6.1.2,б), при этом зерна практически не меняют своей формы [16]. Стадия I (рис.6.1.2) сопровождается ростом зерен, а стадия III (рис.6.1.2) – их измельчением [16], в настоящей работе такие скорости деформации не рассматриваются.

Обратим внимание, но то, что колоколообразный характер кривых для одноосных испытаний (рис.6.1.1) наблюдается не только при падающей скорости деформации, когда постоянна скорость движения захвата, но и в экспериментах с постоянной истинной скоростью деформации, например, на это явно указано в [22]. В связи с тем, что модели (6.1.1), (6.1.2) не могут описать падение напряжений на стадии СП, очевидна ограниченность их применимости. Обзор экспериментальных методов определения скоростной чувствительности с их анализом приведен в монографии Р.А. Васина, Ф.У. Еникеева [16], там же указывается, что «следует всегда помнить о том, что параметр m , вообще говоря, не может рассматриваться как материальная постоянная, поскольку его величина сильно зависит от скорости деформации. В связи с этим в литературе по СП обычно оговаривается, для какого именно интервала скоростей деформаций получено то или иное значение m » (зависимость m от скорости деформации отражена авторами [16] на схеме, приведенной на рис.6.1.2). Добавим, что в общем случае для корректного описания экспериментальной кривой параметр m должен зависеть и от накопленной деформации, поскольку при экспериментальных исследованиях «по диаграммам σ – ε определяют σ при некотором фиксированном значении деформации $\varepsilon=\varepsilon_0$ » [16], очевидно, что выбор ε_0 будет влиять на определение m (в большинстве экспериментов уровень напряжений падает при СП, скорость падения может быть разной).

В качестве обобщений вышеприведенных ОС предложены уравнения, включающие учет температуры [326, 327] –

$$\dot{\varepsilon} = A\sigma^m \exp\left(-\frac{U}{k\theta}\right), \quad (6.1.3)$$

учет температуры и размера зерна [367] –

$$\dot{\varepsilon} = A \left(\frac{c}{d} \right)^p \sigma^{\frac{1}{m}} \exp \left(-\frac{U}{k\theta} \right), \quad (6.1.4)$$

где U – энергия активации, k – постоянная Больцмана, θ – абсолютная температура деформации, A – постоянная материала, d – размера зерна, p , c – дополнительные параметры модели.

Дальнейшее развитие макрофеноменологических моделей исследователями часто осуществляется с использованием выявленной в экспериментах информации о механизмах деформирования (поэтому в таких моделях содержатся и элементы физического подхода, однако рассмотрение ведется не на уровне реализации механизмов, а в терминах макромасштабных переменных). Для примера рассмотрим работу [403]. Авторами цитируемой публикации проанализированы три модели с целью применения для описания СП испытаний алюминиевого сплава 7475. Модель Набарро – Херринга базируется на гипотезе об изменении формы кристаллитов путем самодиффузии, что обеспечивает деформирование материала как вязкой жидкости; скорость обусловленного диффузией течения определяется соотношением

$$\dot{\varepsilon} = 14 \left(\frac{D_L}{d^2} \right)^p \left(\frac{Eb^3}{k\theta} \right) \left(\frac{\sigma}{E} \right)^1, \quad (6.1.5)$$

где D_L – коэффициент диффузии в зернах, E – модуль Юнга, b – модуль вектора Бюргера. В данной модели параметр скоростной чувствительности принимает значение 1, что выше значений, получаемых в экспериментах. В [403] также отмечается, что эта модель обычно не используется для описания СПД, так как предсказывает скорости деформирования почти на порядок ниже, чем в опытах.

Модели Эшби – Веррала и Хайдена основываются на том, что лидирующим механизмом деформирования является ЗГС, которое сопровождается аккомодационными процессами. В модели Эшби – Веррала ЗГС осуществляется путем диффузионного массопереноса по границам или через зерна (по аналогии с ползучестью Набарро-Херринга и Кобла); принимается, что за счет смены соседних зерен их форма сохраняется равноосной; скорость деформации определяется как

$$\dot{\varepsilon} = \frac{100\Omega}{k\theta d^2} \left(\sigma - \frac{0.2\gamma}{d} \right)^n D_L \left(1 + \frac{3.3\delta D_{gb}}{dD_L} \right), \quad (6.1.6)$$

где Ω – атомный объем, γ – поверхностное натяжение, $\frac{0.2\gamma}{d}$ – пороговое напряжение, при котором осуществляется смена соседних зерен, D_{gb} – коэффициент диффузии по границам зерен, δ – ширина границ зерен. В сравнении с первой моделью отмечается, что данная модель позволяет более точно описать связь между скоростью деформирования и напряжением. В модели Хайдена принимается, что аккомодация ЗГС реализуется за счет ВДС; скорость деформации определяется соотношением

$$\dot{\varepsilon} = 1.2 \times 10^6 \frac{Eb}{k\theta} \left(\frac{b}{d} \right)^2 \left(\frac{\sigma}{E} \right)^2 D_L \left(1 + \frac{3.3\delta D_{gb}}{dD_L} \right). \quad (6.1.7)$$

Значение параметра скоростной чувствительности в модели Хайдена (0.5) близко к полученному в опыте при размере зерна 13 мкм. Последнее означает, что результаты согласуются только при достаточно большом размере зерна. Отмечается [403], что эта модель не дает возможности объяснить изменение параметра скоростной чувствительности с изменением размера зерна.

Придя к выводу, что приведенные выше модели, в основе которых лежит рассмотрение отдельных механизмов, не позволяют в достаточной мере описать экспериментальные данные, авторы [403] предложили свою модель, обобщающую две вышеприведенные. Была выдвинута гипотеза о смене ролей механизмов деформирования с изменением размера зерен. Полагается, что аккомодация ЗГС происходит за счет диффузионного течения и ВДС: в результате конкурирования этих двух процессов друг с другом сконцентрированные в тройных стыках напряжения релаксируют более быстро. Скорость деформирования для СПД в предложенной модели определяется как

$$\dot{\varepsilon}^{gs} = \dot{\varepsilon}_{A-V}^{gs} + \dot{\varepsilon}_{slip}^{gs}, \quad (6.1.8)$$

где первое слагаемое описывается согласно модели Эшби – Веррала (6.1.6), а второе – по модели Хайдена с использованием соотношения (6.1.7). Полученные

результаты моделирования и экспериментальные данные находятся в хорошем соответствии.

В таком же ключе, с привлечением информации о физических механизмах, исследователи усовершенствовали макрофеноменологические соотношения, например, учетом изменения среднего размера зерна [222], введением дополнительных макромасштабной переменной для характеристики плотности дислокаций и уравнения для ее изменения [72].

Макрофеноменологические модели применяются в качестве начального приближения для решения различных прикладных инженерных задач при определенных обозначенных выше условиях. Поскольку такие модели не включают явным образом различные физические механизмы процесса и не учитывают описание изменения структуры при деформировании, они «не допускают прогнозирования поведения материала в изменяющихся деформационных, температурных и структурных условиях» [113], что ограничивает их применимость для описания реальных технологических процессов. Например, в работах [149, 241] предлагается выбирать параметры закона (6.1.2) для обеспечения лучшего соответствия экспериментальным данным результатов моделирования технологического процесса при двух тестовых формовках; фактически модель техпроцесса с таким ОС представляет собой аппроксимацию опытных данных для тестовых формовок на промежуточный интервал воздействий, не будучи применимой при отклонениях от него; как представляется, применение такой модели ограничено конкретным технологическим процессом.

Реологические структурно-механические модели также способны описывать поведение материала в зависимости от температуры и скорости деформирования. В моделях этого класса одним из базовых элементов выступает нелинейно-вязкий элемент (НВЭ), для которого принимается связь (6.1.1) или (6.1.2). Модели создаются агрегированием стандартных и НВЭ-элементов с задачей описания сигмоидальной кривой зависимости напряжения от скорости деформирования при СП (рис.6.1.2) [441]. Обобщенная одномерная модель состоит из элементов, соединенных последовательно: вязкоупругого (используется обобщенное тело

Максвелла с учетом температуры) и «сверхпластического» (применяется феноменологическая модель СП деформирования, включающая размер зерна). Цель построения такой модели заключается в описании не только режима СП, но и переходных к нему режимов, как отмечается в [11].

В статье [121] рассмотрены особенности реологического поведения металлов в реальных процессах их обработки давлением, предлагается реологическая модель, включающая обобщенный структурный параметр, характеризующийся средним размером зерна. Отмечается, что в реальных технологиях структура материала (фазовый состав, размер фаз и зерен) значительно изменяется, в связи с чем в модели необходимо сформулировать кинетическое соотношение, позволяющее это учесть. Предлагается такое соотношение для обобщенного структурного параметра при СПД и уравнение для описания динамической рекристаллизации в процессе вязкопластического деформирования материала с крупным и средним зерном.

Термодинамические модели СП содержат описание процесса в рамках статистико-термодинамического подхода. В построенных в рамках этого подхода моделях О.Б.Наймарка [80, 81] полагается, что в режиме стабильного СП течения сохраняется постоянный уровень пористости за счет того, что в результате ЗГС одни поры зарождаются, а другие схлопываются; изменение объема пор приводит к выходу из СП режима: увеличение объема пор связывается с разрушением, их уменьшение обуславливает переход к другим механизмам деформирования.

В работах Я.И. Рудаева и коллег [41, 42, 113 и др.] приведена модель, позволяющая описывать деформирование алюминиевых сплавов при СП с реализацией более существенной динамической рекристаллизации, чем в описанном выше сценарии «обычного» СПД испытания. Авторы цитируемых работ используют термин «динамическая» СП для обозначения этого отличия от структурной СП, т.е. динамическая СП возможна в материалах с исходно неподготовленной структурой (например, литой или слабо деформированной [113]). При динамической СП происходит предварительный и затем сопутствующий процесс формирования равноосной ультрамелкозернистой структуры в результате достаточно продолжительного неупругого

деформирования зерен, вследствие которого происходит разогрев и динамическая рекристаллизация. В перечисленных работах этот процесс назван структурным фазовым переходом. Он реализуется в алюминиевых сплавах за счет динамической рекристаллизации, при моделировании используются положения и соотношения теории неравновесных фазовых переходов. В работе тех же авторов [40] при рассмотрении поведения производства энтропии при СПД получено, что «минимизации энтропии отвечает образование упорядоченной равноосной ультрамелкозернистой структуры, позволяющей прогнозировать возникновение структурной ситуации, способствующей осуществлению механизма зернограничного проскальзывания», т.е. осуществляется формирование термодинамически оптимальной структуры, которое сопровождается выделением открытой системой энтропии в условиях, отличных от термодинамического равновесия.

В последние десятилетия широкое распространение получил физический подход (п.1.3). Приведенная выше информация о результатах экспериментальных исследований подтверждает сложность реализуемых при СП-испытании сценариев: действуют и взаимодействуют несколько физических механизмов, значительно меняется структура материала. Согласно этим данным ЗГС является лидирующим при СПД, однако существенную роль играют также и другие механизмы и процессы: ВДС, зернограничная диффузия, ротации кристаллитов, динамическая рекристаллизация. При использовании физического подхода необходимо, по возможности, в максимальном объеме использовать информацию о реализации всех механизмов и их взаимодействии.

Путем рассмотрения ЗГС в бикристаллах с электронно-микроскопическими исследованиями было установлено наличие в границах зерен зернограничных дислокаций (ЗГД) [38, 104], которые могут перемещаться путем скольжения и переползания. Выделяют два основных типа ЗГД: собственные (или «внутренние») и несобственные (или «внешние», «внесенные», «наведенные», «избыточные»). Собственные ЗГД всегда существуют в границе, подстраивая ее структуру к разориентировке зерен, и обеспечивают минимум энергии границы, способствуют образованию близкой к равновесной структуры границ зерен.

Несобственные ЗГД не являются элементами равновесной структуры, образуются при взаимодействии границы с решеточными дислокациями (РД), границы являются источниками и стоками РД [12, 20, 38, 90].

Границы зерен выступают в качестве активных источников и стоков вакансий (согласно [39] вакансии зарождаются и поглощаются ядрами ЗГД при их скольжении или переползании в границе). При повышенных температурах поглощение и испускание РД (и вакансий) осуществляются активней, что приводит к разупрочнению приграничных областей (увеличению скорости возврата и ЗГС). При низких температурах границы зерен действуют в роли барьеров, что приводит к упрочнению (в п.2.2 приводится информация о подмодели упрочнения ВДС за счет влияния границ, разработанной научным консультантом автора П.В. Трусовым и коллегой Н.С. Кондратьевым, в п.6.2 эта подмодель модифицирована учетом ЗГС).

При переходе от описания ЗГС бикристаллов к поликристаллам при сохранении основных закономерностей необходимо учесть, что границы в поликристаллах выходят на линии тройных стыков зерен. Многие «физические» модели СП различаются принятым предположением о способе «преодоления» тройного стыка – обеспечении совместности сдвигов по сходящимся в нем границам (обзор основополагающих работ приведен в [240]).

В [106] приводится анализ моделей с преодолением тройного стыка, критикуется использование макрофеноменологических соотношений, в частности, модель Эшби-Веррала (6.1.6), в которой используется «искусственно сконструированный процесс перестановки зерен в ансамбле из четырех зерен», что соответствует двумерной картине без возможности ее обобщения на трехмерный случай. В [106] отмечается актуальность того, чтобы модель позволяла описывать стадию перехода к режиму стабильного СП течения, сам СП режим и его продолжительность (т.е. ресурс СПД). При этом авторы указывают, что большинство моделей посвящено описанию самого СП режима, им неизвестны работы с описанием входа в него и что практически нет моделей ресурса СПД. В основе последних, как правило, лежит связь между деформацией и накоплением поврежденности в материале в режиме СП: «при низких скоростях

деформации – это поры, сформированные диффузионными потоками вакансий, при высоких скоростях – микротрещины, возникающие при слиянии головных дислокаций скоплений ЗГД, не успевающих релаксировать известными способами при столь высоких скоростях» [106].

В работах А.И. Пшеничнюка, А.П. Жилыева и их коллег предлагаются модели с вариантом решения обозначенных выше вопросов [29]. Принимается, что при СП деформировании возможно совместное движение кластеров зерен, вводится понятие полос кооперативного зернограничного проскальзывания (КЗГП), представляющих собой «объединение отдельных участков течения», в результате чего «деформация осуществляется посредством согласованного сдвига вдоль поверхностей, проходящих через все поперечное сечение образца и предельно близких к плоскостям с максимальными сдвиговыми напряжениями» [107]. Существование полос КЗГП подтверждается в экспериментах: объединение отдельных участков течения в полосы КЗГП происходит как раз в СП режиме. В [107] предложена модель СПД, определяющая связь между скоростью деформации образца и скоростью сдвига в полосе КЗГП с учетом среднего размера зерен. Формулируются условия миграции границ зерен и определяется количество сформированных полос КЗГП; указывается, что учет данного фактора дает возможность устанавливать «интервал СПД в пространстве параметров материала и условий нагружения». При определенной температуре испытания показано, что существует предельный размер зерна, при превышении которого полосы КЗГП не формируются и режим СП не осуществляется.

Необходимость рассмотрения процесса ЗГС на разных масштабных уровнях подтверждена в работах В.Е. Панина и его коллег, разработавших концепцию многоуровневой механики неупругого деформирования твердых тел [94, 95]. Так, в [25, 94, 100] представлены результаты экспериментов по исследованию ЗГС в поликристаллических материалах (свинце и свинцовых сплавах) при различных температурах, подтверждающие многоуровневую природу данного механизма; приведено его теоретическое описание в рамках многоуровневой теории поворотных мод деформации. Данная теория расширяется на случай СП деформирования в [24].

В [23] предлагаются модели на основе анализа коллективного поведения ЗГД, приводящего к образованию и накоплению дислокаций, локальной миграции тройных стыков и инициированию ВДС. В [272] рассматривается связь ЗГС и ротаций зерен: принимается, что многократное разделение ЗГД в тройных стыках способствует их движению вдоль смежных границ, что приводит к формированию дислокационных стенок и, как следствие, поворотам кристаллических решеток зерен.

В работах В.Н. Чувильдеева и коллег применяется теория неравновесных границ [155, 157, 158 и др.], развитая на начальном этапе исследованиями М.В. Грабского, Р. Корского, П.Памфри, Г.Глейтера [157]. Отмечается, что в ряде работ мерой неравновесности выступает энергия границы (равновесная граница обладает минимумом свободной энергии, а неравновесная – избыточной); в границах зерен с высокой энергией подвижность атомов выше по сравнению с границами с низкой энергией, что обуславливает различия в их структурах и диффузионных свойствах. В работе [158] предлагается альтернативный вариант – мерой неравновесности границы является свободный объем, поскольку область границы зерна из-за меньшей атомной упорядоченности в ней обладает некоторым избыточным объемом по сравнению с идеальной кристаллической решеткой. Принимается, что при температуре 0 К геометрически необходимый свободный объем – исходный уровень неравновесности границы, при актуальной температуре неравновесная граница – граница с дополнительным к геометрически необходимому свободным объемом, который образовался за счет попадания в границу зерна других дефектов. Считается, что введение небольшой плотности РД в границу несущественно повышает ее свободную энергию, однако значительно увеличивает ее диффузионную проницаемость (при температуре $0.5T_{пл}$ с повышением энергии границы зерна на 20% коэффициент диффузии увеличивается в 150 раз) [157]. Учитывается, что мера неравновесности границы зависит от внешних воздействий (приложенных сил, температуры) и структуры материала (внутризеренных областей, тройных стыков, субструктуры и т.д.).

В [156] рассмотрен вопрос стадийности кривых при СПД испытаниях (рис.6.1.1), представлена модель, включающая описание 1-й стадии (упрочнения).

Приведены соотношения для зависимости параметров упрочнения от воздействий (скорости деформирования, температуры) и характеристик зеренной структуры материала. Соотношение для роста зерен в процессе СП испытания предлагается в виде степенной зависимости от накопленной деформации. Полагается, что приходящие в границу РД трансформируются в дислокации ориентационного несоответствия (ДОН), скользящие (по своей сути ЗГД) и нормальные (создающие стыковые дисклинации) компоненты делокализованных дислокаций; отмечается, что на внутренние напряжения в зернах вблизи границ влияют только ДОНЫ и скользящие компоненты. Сформулированы соотношения для критического значения размера зерна: при меньшем преобладают ДОНЫ, при большем – скользящие компоненты; предложены уравнения для определения напряжений в каждом случае.

По приведенному в этом разделе обзору существующих моделей СП можно сделать следующие выводы:

1. В основе большинства моделей лежат макрофеноменологические соотношения вида (6.1.1), (6.1.2) и их модификации. С применением данных представлений сформирована большая описательная база для СП режима и его особенностей для различных материалов. Такие модели применяются в качестве первого приближения при решении прикладных инженерных задач с гипотезой о реализации СП режима во время всего процесса.

2. Упомянутые модели имеют ограниченную область применимости (при определенных температурно-скоростных воздействиях (в узких диапазонах), виде нагружения, исходной структуре материала), не позволяют описать поведение материала в условиях изменения воздействий и структуры материала и, как следствие, не обладают прогнозными свойствами. Причинами этого являются: ориентация моделей на описание СП режима без рассмотрения переходных процессов, использование только макропеременных без описания физических механизмов деформирования и эволюционирующей структуры. Кроме того, часто в моделях данных классов рассматривается только одномерная или двумерная картина СПД без обоснования формального обобщения на трехмерный случай.

3. В значительной степени перечисленные особенности можно отнести и к более сложным термодинамическим моделям СПД. В рамках данных моделей есть возможность описывать различные переходные процессы (устанавливать условия реализации режима СПД, а также перехода к нему и выхода из режима) и анализировать устойчивость структуры. Соотношения таких моделей также обычно опираются на макропараметры без явного рассмотрения физических механизмов деформирования и изменяющейся структуры на различных масштабных уровнях (например, имеющего место деформирования зерен за счет ВДС). Однако стоит отметить, что элементы термодинамического подхода часто используются и при многоуровневом моделировании в рамках физического подхода.

4. В качестве основного преимущества интенсивно развивающегося в последние десятилетия физического подхода можно выделить возможность явного описания механизмов и эволюции структуры материала на различных масштабных уровнях. Именно аппарат многоуровневого моделирования в рамках физического подхода представляется наиболее эффективным при построении моделей, позволяющих описывать смену режимов деформирования, ролей механизмов деформирования и эволюцию структуры (в частности, и для технологических процессов, реализующих режим СП). Однако, хотя, как видно из обзора, в данном направлении множеством исследователей сделаны существенные шаги, автору не встречались многоуровневые модели на основе ФТП (п.1.3), учитывающие механизм ЗГС и описывающие СПД и переходы к нему.

В связи с вышеприведенным в п.6.2 предлагается новая расширенная трехуровневая модель поликристаллического материала, способная описывать как режим структурной СП, так и переход к нему, выход из него, и включающая описание действующих и взаимовлияющих механизмов и изменяющейся структуры материала.

6.2. Трехуровневая модель, включающая описание ключевых механизмов деформирования и изменения структуры

Разработанная совместно с научным консультантом П.В. Трусовым и коллегой Э.Р. Шарифуллиной, базирующаяся на физических теориях упруговязкопластичности конститутивная модель учитывает значимые при СПД взаимодействующие механизмы и процессы – ЗГС, ВДС, динамическую рекристаллизацию, ротации зерен и зернограничную диффузию; модель предназначена для описания деформирования как в режиме СП, так и переходов к нему, в частности, позволяет воспроизвести приведенный выше сценарий деформирования, наблюдаемый в экспериментах на СПД.

Предлагаемая трехуровневая статистическая модель [140] является обобщением двухуровневой конститутивной модели для описания деформирования поликристаллических материалов (п.4.2). Напомним, что в последней, в отличие от традиционных статистических моделей типа Тейлора – Бишопа – Хилла (п.1.3), принимается во внимание топология – взаиморасположение зерен в пространстве (п.2.1).

В расширенной модели [140] на мезоуровне учитываются механизмы ВДС и ротаций решеток зерен с учетом взаимодействия с механизмом ЗГС, изменение формы и взаиморасположения зерен и динамическая рекристаллизация. Уровень описания ЗГС вводится как отдельный модельный структурный уровень (рис.6.2.1), связывающий макромасштабный уровень, на котором осуществляется кинематическая реализация ЗГС, и мезомасштабный уровень, на котором учитывается состояние границы (изменяющееся при действии зернограничной диффузии) и ее взаимодействие с ВДС зерна. ПО макроуровня представляется совокупностью различно ориентированных кристаллитов и границ. Модель обобщается как трехуровневая: макроуровень – структурный уровень описания ЗГС – мезоуровень.

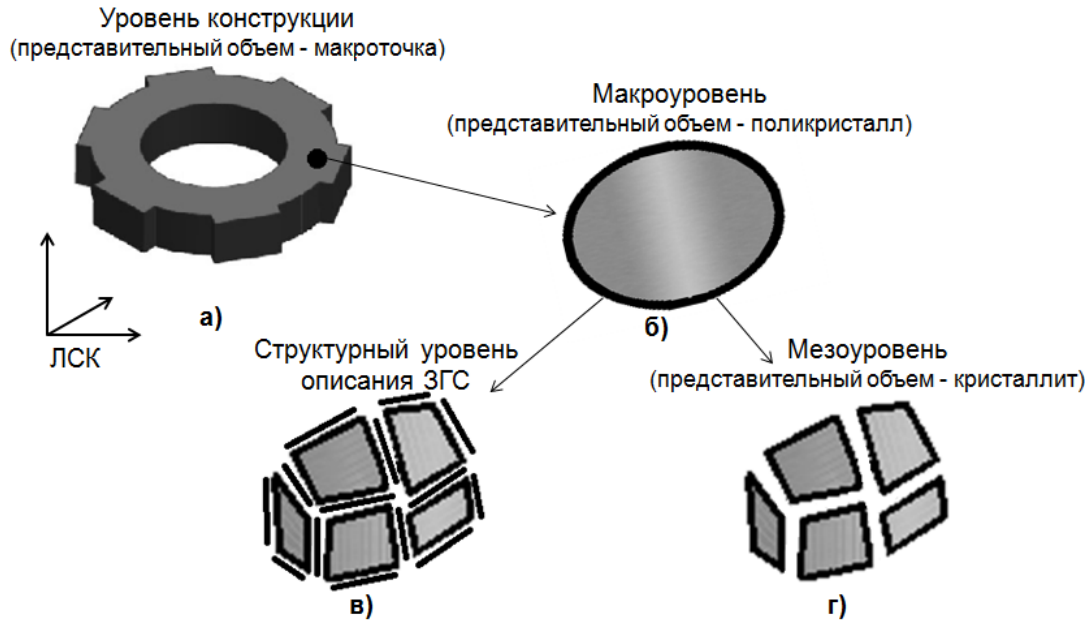


Рис.6.2.1. Схематичное представление уровней модели [159]

Рассмотрим далее соотношения предлагаемой модели для описания процессов на различных уровнях.

Соотношения модели на макроуровне

Поведение материала на макромасштабном уровне описывается следующей системой соотношений (индексы кристаллитов и границ здесь и далее опущены):

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \mathbf{K}^{\text{cor}} \equiv \dot{\mathbf{K}} - \boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{K} + \mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\Omega} = \mathbf{\Pi} : (\mathbf{L} - \boldsymbol{\Omega} - \mathbf{Z}_{\text{gb}}^{\text{in}} - \mathbf{Z}^{\text{in}} - \mathbf{Z}^{\text{th}}), \\
 \mathbf{\Pi} = \langle \mathbf{n} \rangle, \\
 \boldsymbol{\Omega} = \langle \boldsymbol{\omega} \rangle, \\
 \mathbf{Z}_{\text{gb}}^{\text{in}} = \left[\begin{array}{l} \text{соотношения промежуточного уровня} \\ \text{для определения } \mathbf{Z}_{\text{gb}}^{\text{in}} \end{array} \right], \\
 \mathbf{Z}^{\text{in}} = \langle \mathbf{z}^{\text{in}} \rangle + \mathbf{\Pi}^{-1} : \langle \mathbf{n}' : \mathbf{z}^{\text{in}'} \rangle + \mathbf{\Pi}^{-1} : (\langle \mathbf{k}' \cdot \boldsymbol{\omega}' \rangle - \langle \boldsymbol{\omega}' \cdot \mathbf{k}' \rangle), \\
 \mathbf{Z}^{\text{th}} = \langle \mathbf{z}^{\text{th}} \rangle + \mathbf{\Pi}^{-1} : \langle \mathbf{n}' : \mathbf{z}^{\text{th}'} \rangle, \\
 \mathbf{Q} = \langle \mathbf{q} \rangle + \langle \mathbf{q}_{\text{gb}} \rangle_{\text{gb}}, \\
 \mathbf{K}|_{t=0} = \mathbf{K}_0,
 \end{array} \right. \quad (6.2.1)$$

где использованы переменные и модифицированы соотношения, приведенные в постановке задачи описания деформирования ПО с использованием двухуровневой конститутивной модели (п.4.2). Дополнительно в трехуровневой

модели введены переменные: \mathbf{Z}_{gb}^{in} – неупругая составляющая скорости деформации за счет ЗГС; \mathbf{Z}^{in} обозначает, как и ранее, неупругую составляющую скорости деформации за счет ВДС; q_{gb} – мощность внутреннего теплового источника за счет ЗГС по отдельной границе, $\langle q_{gb} \rangle_{gb}$ – совокупная мощность внутренних тепловых источников за счет ЗГС ($\langle \rangle_{gb}$ – операция осреднения по границам). Соотношения промежуточного уровня для определения \mathbf{Z}_{gb}^{in} и $\langle q_{gb} \rangle$ описываются ниже. Поскольку ЗГС оказывает влияние на ВДС, следует переопределить формулировку модели мезоуровня.

Соотношения модели на мезоуровне

Соотношения на мезоуровне, применяемые для каждого однородно деформируемого кристаллита, принимаются в виде:

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{k}^{cor} \equiv \dot{\mathbf{k}} + \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\omega} - \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{k} = \mathbf{p} : (\mathbf{I} - \boldsymbol{\omega} - \mathbf{z}^{in} - \mathbf{z}^{th}), \\ \hat{\mathbf{V}}\mathbf{v}^T = \hat{\mathbf{V}}\mathbf{V}^T - \mathbf{Z}_{gb}^{in}, \quad \theta = \Theta, \quad \dot{\theta} = \dot{\Theta}, \\ \mathbf{z}^{in} = \sum_{i=1}^K \dot{\gamma}^{(i)} \mathbf{b}^{(i)} \mathbf{n}^{(i)}, \\ \dot{\gamma}^{(k)} = \dot{\gamma}_0 \left(\tau^{(k)} / \tau_c^{(k)} \right)^m H(\tau^{(k)} - \tau_c^{(k)}), k = 1, \dots, K, \\ \tau^{(k)} = \mathbf{k} : \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)}, \quad k = 1, \dots, K, \\ \dot{\tau}_c^{(k)} = [\text{соотношения для определения } \dot{\tau}_c^{(k)}], k = 1, \dots, K, \\ \boldsymbol{\omega} = [\text{соотношения для определения } \boldsymbol{\omega}], \dot{\boldsymbol{\omega}} \cdot \boldsymbol{\omega}^T = \boldsymbol{\omega}, \\ \mathbf{z}^{th} = \boldsymbol{\alpha} \dot{\theta}, \\ q = \alpha \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{z}_s^{in} / \hat{\rho}, \\ \boldsymbol{\sigma} = \left(\hat{\rho} / \rho \right) \mathbf{k}, \\ \mathbf{k}|_{t=0} = \mathbf{k}_0, \tau_c^{(k)}|_{t=0} = \tau_{c0}^{(k)}, \gamma^{(k)}|_{t=0} = \gamma_0^{(k)}, k = 1, \dots, K, \mathbf{o}|_{t=0} = \mathbf{o}_0. \end{array} \right. \quad (6.2.2)$$

По сравнению с уравнениями постановки для двухуровневой модели в п.4.2 в (6.2.2)₂ учтено, что часть кинематических воздействий реализуется за счет

механизма ЗГС (\mathbf{z}_{gb}^{in}), кроме того, действие ЗГС учтено при описании упрочнения ВДС и ротации ПСК (соотношении для ее спина $\boldsymbol{\omega}$), приведенных далее.

В модели использовалось определение параметра $\dot{\gamma}_0 = \eta D_u$, $D_u = \sqrt{\frac{2}{3} \mathbf{D}' : \mathbf{D}'}$, $\eta = 1$ (заметки по поводу альтернативных вариантов определения $\dot{\gamma}_0$ приведены в п.2.2); зависимость напряжения течения от скорости деформации и температуры вносится в соотношения для изменения критических напряжений ВДС и ЗГС, рассматриваемые далее. Заметим, что возможным двойникованием можно пренебречь из-за рассмотрения значительных температур, характерных для режимов деформирования, близких к СП.

При определении спина ПСК кристаллитов $\boldsymbol{\omega}$ используется модель ротации, описанная для двухуровневой модели в п.4.2, согласно которой ПСК связывается с элементами симметрии зерен (подход к формулировке геометрически нелинейных кинематических и ОС описан в гл.3). Реализация ЗГС по нескольким границам зерна может вызвать его дополнительный поворот из-за действия сдвиговых напряжений по границам, поэтому к указанному спину $\bar{\boldsymbol{\omega}}_{pl}$ добавляется составляющая $\bar{\boldsymbol{\omega}}_{gb}$:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\omega} = \bar{\boldsymbol{\omega}}_{pl} + \bar{\boldsymbol{\omega}}_{gb} = & -(\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{l}^e \cdot \mathbf{k}_1) \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 - (\mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{l}^e \cdot \mathbf{k}_1) \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_3 + \\ & + (\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{l}^e \cdot \mathbf{k}_1) \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_1 - (\mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{l}^e \cdot \mathbf{k}_2) \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 + \\ & + (\mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{l}^e \cdot \mathbf{k}_1) \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_1 + (\mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{l}^e \cdot \mathbf{k}_2) \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_2 + \chi \boldsymbol{\mu}_\tau H \left(\left\| \left\langle \mathbf{z}_{gb}^{in} \right\rangle_{grain} \right\| \right), \end{aligned} \quad (6.2.3)$$

где χ – параметр модели, характеризующий вязкое сопротивление границ ротациям, $\boldsymbol{\mu}_\tau$ – момент в результате действия касательных усилий на границах зерна, $\left\langle \mathbf{z}_{gb}^{in} \right\rangle_{grain}$ – средняя по границам зерна скорость деформации за счет ЗГС ($\left\langle \right\rangle_{grain}$ – осреднение по всем границам зерна), норма тензора второго ранга \mathbf{T} введена как $\|\mathbf{T}\| = \sqrt{\mathbf{T} : \mathbf{T}^T}$, $\mathbf{l}^e = \hat{\nabla} \mathbf{v}^T - \mathbf{z}^{in} - \mathbf{z}^{th}$ — упругая составляющая градиента скорости перемещений на мезоуровне (кристаллита).

Для мелкозернистых материалов, которые и рассматриваются в качестве исходной структуры для СПД, необходим учет упрочнения за счет

взаимодействия решеточных дислокаций с границами зерен (п.2.2), поэтому закон упрочнения может быть представлен в виде [46]:

$$\dot{\tau}_c^{(k)} = \dot{\tau}_{st}^{(k)} + \dot{\tau}_b^{(k)}, \quad (6.2.4)$$

где $\dot{\tau}_{st}^{(k)}$ – скорость изменения критических напряжений из-за барьеров внутри зерна, $\dot{\tau}_b^{(k)}$ – за счет границ кристаллитов.

Согласно разработанному на основе анализа экспериментальных данных сценарию деформирования при СПД испытании принимается, что в начальном состоянии (после предварительной обработки методами интенсивной пластической деформации) зерна могут быть или рекристаллизованными с близкой к шаровой формой, или нерекристаллизованными с произвольной формой. Для исходно рекристаллизованных зерен первой составляющей упрочнения в (6.2.4) пренебрегается $\dot{\tau}_{st}^{(k)} = 0$, так как плотность дефектов низка и при ВДС почти не образуются дополнительные барьеры. Для исходно нерекристаллизованных кристаллитов так же, как в постановке для двухуровневой модели в п.4.2, использован известный закон упрочнения вида [183], однако – с модификациями:

$$\dot{\tau}_{st}^{(k)} = \sum_{l=1}^K h^{(kl)} \dot{\gamma}^{(l)} - A \left(\exp[\tau_c^{(k)} / \bar{\tau}] - 1 \right) \exp\left(-\frac{U}{k\theta}\right), \quad (6.2.5)$$

$$h^{(kl)} = \left[q_{lat} + (1 - q_{lat}) \delta^{(kl)} \right] h^{(l)}, \quad h^{(l)} = h_0 \left| 1 - \tau_c^{(l)} / \tau_{sat} \right|^a,$$

где q_{lat} – параметр латентного упрочнения ($q_{lat}=1$ для компланарных, $q_{lat}=1.4$ – для некопланарных СС ВДС (с номерами k и l)), $\delta^{(kl)}$ — дельта Кронекера, k – постоянная Больцмана, A , U , $\bar{\tau}$, τ_{sat} , a – определяемые при идентификации модели параметры. При рассматриваемых температурах реализуются процессы динамического возврата и диффузии, что обуславливает зависимость напряжений от скорости деформации и температуры по моде ВДС (это известно из опытов на образцах из крупнозернистых материалов). Второе слагаемое аррениусовского типа в (6.2.5) характеризует уменьшение сопротивления ВДС в результате диффузионных процессов: при увеличении температуры и уменьшении скорости деформации увеличиваются вероятности преодоления барьеров различной

природы движущимися решеточными дислокациями (РД) и разрушения этих барьеров.

В [2008] с использованием феноменологического подхода, изложенного в [305], предлагается способ учета эффекта динамического возврата в физической модели пластичности (для описания «обычного» неупругого деформирования) с использованием соотношений микроуровня для кинетики плотностей дислокаций по СС, что стоит отметить как возможное направление развития модели в дальнейшем. В предложенной в настоящей работе модели снижение скорости упрочнения вследствие действия указанных факторов (увеличении температуры и уменьшении скорости деформации) описывается путем определения параметра упрочнения в виде $h_0 = h_{fixD} (D_0 / D_{0fix})^p$, где h_{fixD} – значение, определяемое при идентификации модели по результатам эксперимента с некоторой фиксированной начальной скоростью деформации D_{0fix} , p – параметр модели, вычисляемый путем сопоставления максимальных напряжений в испытаниях при двух разных начальных скоростях деформации (подробней процедура идентификации описана в п.6.3). Заметим, что хотя все результаты, приведенные в п.6.3, получены для случая постоянной температуры (это условие обеспечивается в экспериментах, обзор которых приведен выше), структура модели предложена для общего неизотермического случая, в частности, все параметры модели упрочнения в общем случае будут зависеть от температуры.

Зернограничное упрочнение обусловлено накоплением дефектов (ДОН) в границе – РД будут испытывать дополнительное сопротивление за счет полей упругих напряжений от ДОН (п.2.2). Для определения вклада $\dot{\tau}_b^{(k)}$ в скорость изменения критического напряжения ВДС (6.2.4) от действия границ без учета ЗГС были использованы соотношения, сформулированные в [48, 49]. При активации ЗГС ДОН трансформируются в ЗГД [12, 373, 375], в результате плотность накопленных ДОН снижается, что вызывает уменьшение или даже смену знака $\dot{\tau}_b^{(k)}$. Для учета обозначенного фактора предлагается следующая модификация соотношений [48, 49] для упрочнения за счет границ:

$$\dot{\tau}_b^{(k)} = \begin{cases} \left[\left(\frac{\|\mathbf{z}_s^{\text{in}}\| - \|\langle \mathbf{z}_{\text{gb}}^{\text{in}} \rangle_{\text{grain}}\|}{\|\mathbf{z}_s^{\text{in}}\|} \right) \dot{\tau}_{b [\text{без ЗГС}] }^{(k)}, & \text{если } \|\mathbf{z}_s^{\text{in}}\| \geq \|\langle \mathbf{z}_{\text{gb}}^{\text{in}} \rangle_{\text{grain}}\|, \\ -\alpha \left[\left(\frac{\|\langle \mathbf{z}_{\text{gb}}^{\text{in}} \rangle_{\text{grain}}\| - \|\mathbf{z}_s^{\text{in}}\|}{\|\mathbf{z}_s^{\text{in}}\|} \right) \tau_b^{(k)}, & \text{если } \|\mathbf{z}_s^{\text{in}}\| < \|\langle \mathbf{z}_{\text{gb}}^{\text{in}} \rangle_{\text{grain}}\|, \end{cases} \quad (6.2.6)$$

где $\|\mathbf{z}_s^{\text{in}}\|$ – норма скорости деформации зерна за счет ВДС, $\langle \mathbf{z}_{\text{gb}}^{\text{in}} \rangle_{\text{grain}}$ – средняя скорость деформации за счет ЗГС по границам зерна ($\langle \rangle_{\text{grain}}$ – осреднение по всем границам рассматриваемого зерна; отметим отличие этого осреднения от используемого при определении $\mathbf{Z}_{\text{gb}}^{\text{in}}$, когда проводится описанное ниже осреднение по всем границам зерен, входящих в представительный макрообъем), норма тензора второго ранга \mathbf{T} определена как $\|\mathbf{T}\| = \sqrt{\mathbf{T}:\mathbf{T}^T}$, $\dot{\tau}_{b [\text{без ЗГС}]}^{(k)}$ – скорость изменения критических напряжений без учета ЗГС, определяемая согласно [48, 49] с учетом зависимости от текущего размера зерна, α – параметр.

В (6.2.6) явно учитывается, что при реализации ЗГС часть ДОН диссоциирует в ЗГД, что приводит, в зависимости от соотношения скоростей ВДС и ЗГС, к ослаблению зернограницного упрочнения или к разупрочнению ($\tau_b^{(k)}$ в правой части (6.2.6)₂ отражает накопленную плотность дефектов в границе; модель может быть расширена явным введением переменных для плотностей дефектов различных типов). Согласно принятым соотношениям при низкой гомологической температуре для мелкозернистого материала с подготовленной к СП структурой ЗГС не будет реализовываться (соотношения для его описания приведены ниже), поэтому имеет место существенное упрочнение по моде ВДС, в основном вызванное влиянием границ. При температуре из необходимого для СП диапазона ЗГС будет активно и согласно (6.2.6) критические напряжения ВДС будут снижаться, вызывая уменьшение напряжений течения для представительного макрообъема. Таким образом, в модель явно закладывается влияние ЗГС на ВДС.

Как отмечено в п.2.2, в общей постановке система (6.2.2) должна содержать и уравнения для переменных, задающих текущую форму и размеры зерен, массив которых характеризует состояние зеренной структуры, последнее, разумеется, оказывает влияние на параметры соотношений модели. Задачей данной работы было усовершенствование ранее предложенных многоуровневых моделей учетом

ЗГС и применение этого аппарата для описания СПД испытаний. Данные об эволюции зеренной структуры в ходе этих опытов известны: на первой стадии (рис.6.1.1) зерна вытягиваются, на второй – осуществляется динамическая рекристаллизация, обеспечивающая возвращение формы зерен к шаровой, на заключительной стадии форма зерен остается постоянной (описание сценария деформирования приведено выше). Эта экспериментальная информация была напрямую заложена в модель для учета эволюции зеренной структуры при описании процесса СПД испытания. Для моделирования технологических процессов ИПД с СП режимом подмодель описания эволюции зеренной структуры за счет различных процессов должна быть включена в структуру конститутивной модели; описание динамической рекристаллизации представляет собой самостоятельную сложную и ресурсоемкую задачу [136, 382], выходящую за рамки настоящей работы. Обратимся далее к способу учета экспериментальной информации об изменении зеренной структуры в трехуровневой статистической модели.

По данным экспериментов, выбранным для идентификации модели [66, 106, 201 и др.], принимается, что процесс динамической рекристаллизации начинается приблизительно на середине первой стадии СПД испытания и завершается (в модельном приближении полагается, что все зерна рекристаллизовались) после некоторого периода третьей стадии. Поэтому приняты следующие значения продольной компоненты тензора деформации Генки H_0, H_F в момент начала и окончания процесса рекристаллизации: $H_0 = 0.5$, $H_F = 1.52$. Задается линейный рост объема зерна от начального при H_0 до финального размера при H_F (начальный размер рекристаллизованных зерен – 1.2 мкм, конечный размер рекристаллизованных зерен – 2 мкм для начальной скорости деформации $D_0 = 10^{-3} \text{ с}^{-1}$, 1.5 мкм – для $D_0 = 10^{-2} \text{ с}^{-1}$). Так же (линейно) определен рост доли рекристаллизованной фазы от начального значения до 1. Отметим, что получаемое в классических макрофеноменологических моделях рекристаллизации, основанных на уравнениях типа Аврами – Джонсона – Мела – Колмогорова,

изменение доли рекристаллизованной фазы при деформировании близко к принятому линейному приближению.

Прямое моделирование рекристаллизации, как и ЗГС, затруднено: сложным является переопределение топологии при поглощении нерекристаллизованного зерна рекристаллизованными с разных сторон, кроме того, требуется определить характеристики образованных границ, для чего необходимо разработать весьма сложную модель рекристаллизации [136]. Поэтому в конститутивной модели на основе экспериментальных данных задается приближенное описание процесса рекристаллизации (с использованием статистического характера модели). Вводится «эффективное» зерно, объединяющее свойства рекристаллизованного зерна и нерекристаллизованного зерна (используется свойство статистичности модели и смесевой подход). Характеристики «эффективного» зерна находятся как линейная комбинация характеристик составляющих с учетом текущей доли рекристаллизованной фазы (после достижения продольной деформации H_F характеристики эффективного зерна совпадают с характеристиками заполнившего его объем рекристаллизованного зерна). Можно заметить, что уровень эффективного зерна – отдельный структурный (и масштабный) уровень модели, однако по причине простоты его функционала (по сути, просто агрегирование свойств элементов мезоуровня с существенно разными свойствами во избежание сложностей с описанием рекристаллизации) он не учитывается при подсчете структурных уровней модели. В приведенной ниже модели уровня ЗГС используются характеристики эффективного зерна. Вышеприведенные уравнения мезоуровня применяются отдельно для рекристаллизованного и для нерекристаллизованного зерна. По актуальному размеру эффективного зерна (описанный выше линейный рост задается для него) и доле рекристаллизованной фазы определяется условный размер каждой составной части зерна, которые используются при определении зернограницного упрочнения для них.

Подмодель для описания зернограницного скольжения

При ЗГС происходят относительные смещения кристаллитов вдоль общей границы, наблюдаемые в бикристаллах и поликристаллах [20]. В последних

реализации ЗГС в определенной степени препятствуют соседние кристаллиты, что отражено в сформулированном далее законе упрочнения. В разработанной модели принимается, что границы между зернами представляют собой плоские фasetки нулевой толщины [405], каждая пара соседних зерен в ПО макроуровня имеет общую границу. Смещения кристаллитов происходят по общей границе вследствие перемещения ЗГД, но последние в модели явно не описываются, чтобы избежать расширения модели на микромасштабный уровень (таким образом, так же, как при описании ВДС, применяются осредненные на мезомасштабе характеристики).

Для задания кинематики ЗГС для каждой межзеренной границы вводится ортонормированный базис из векторов \mathbf{n}_{gb} , $\mathbf{b}_{gb}^{(1)}$ и $\mathbf{b}_{gb}^{(2)}$ в трехмерном пространстве: \mathbf{n}_{gb} – нормаль к плоскости границы, $\mathbf{b}_{gb}^{(1)}$ и $\mathbf{b}_{gb}^{(2)}$ – единичные векторы направлений в плоскости границы (в начальный момент времени один из векторов направления смещения привязан к материальному направлению, например, связанному с решеткой одного из кристаллитов, при деформировании ортогональность базиса сохраняется). В статистической конститутивной модели выполняется переход от смещений по границам к деформационным характеристикам: скорость относительного смещения двух зерен по границе между ними аппроксимируется скоростью сдвига ЗГС, осредненным на ПО макроуровня. Эта операция аналогична переходу от рассмотрения движения отдельной дислокации к скорости сдвига по СС, осуществляемому согласно уравнению Орована [364] при описании ВДС (п.1.3, п.2.1). На рис.6.2.2 представлена схема аппроксимации смещения по границе сдвигом ЗГС для пары кристаллитов из ПО (процедура применяется для всех границ, на которых реализуется смещение). Можно сказать, что при этом переходе используется свойство статистичности модели: в ПО макроуровня для мелкозернистого материала найдется достаточно много близких по геометрии и свойствам границ.

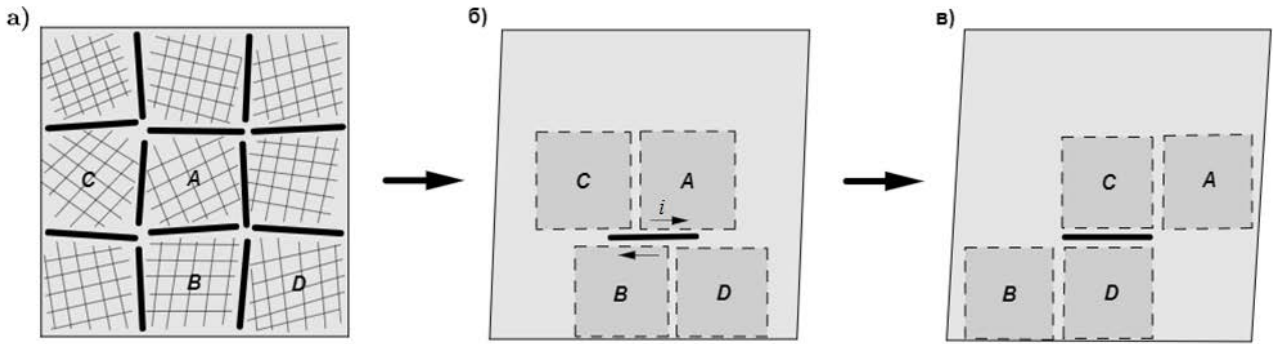


Рис.6.2.2. Схема принятой в рамках модели кинематики ЗГС:

а) изображение ПО поликристалла; б), в) иллюстрация относительного смещения сдвигом двух кристаллитов по направлению i вдоль границ

Рассматривая движение ЗГД в границе с использованием вязкопластического соотношения для средней скорости их перемещения, скорость сдвига в ПО макроуровня, на который распространяется скорость смещения по локальной границе зерен, можно вычислить следующим образом [402]:

$$\begin{aligned} \dot{\gamma}_{gb}^{(i)} &= \frac{S_{gb}^{(i)}}{V} v_{gb0} \left(\tau_{gb}^{(i)} / \tau_{cgb}^{(i)} \right)^n H(\tau_{gb}^{(i)} - \tau_{cgb}^{(i)}) = \\ &= \dot{\gamma}_{gb0}^{(i)} \left(\tau_{gb}^{(i)} / \tau_{cgb}^{(i)} \right)^n H(\tau_{gb}^{(i)} - \tau_{cgb}^{(i)}), \quad i = 1, 2, \dots, 4K_{gb}, \end{aligned} \quad (6.2.7)$$

где $v_{gb0} = b_{gb}^{(i)} \rho_{gb}^{(i)} v_0 \Delta l_{gb}$ – характерная скорость перемещения всех ЗГД в границе, $b_{gb}^{(i)}$ – модуль аналога вектора Бюргерса ЗГД (i –й СС ЗГС, вводимой по аналогии с СС ВДС через векторы \mathbf{n}_{gb} , $\mathbf{b}_{gb}^{(1)}$, $\mathbf{b}_{gb}^{(2)}$; в каждой границе вводится четыре СС ЗГС для отдельного учета положительных и отрицательных сдвигов, $\rho_{gb}^{(i)}$ – плотность ЗГД (размерности 1/м), вводимая (см., например [90]) как отношение общей длины ЗГД в границе к площади границы, $v_0 \Delta l_{gb}$ – некоторая характерная скорость перемещения ЗГД на участке фасетки границы); величина $\dot{\gamma}_{gb0}^{(i)} = \frac{\text{об } S_{gb}^{(i)}}{V} v_{gb0}$ определяет скорость сдвига в ПО при $\tau_{gb}^{(i)} = \tau_{cgb}^{(i)}$, $S_{gb}^{(i)}$ – площадь рассматриваемой границы, V – объем ПО макроуровня; n – параметр, $4K_{gb}$ – общее количество СС ЗГС, K_{gb} – число границ. Приведенное определение v_{gb0} предполагает введение в модель

микромасштабного уровня, на котором необходимо описать в явном виде изменение характеристик дефектной структуры (эволюцию $\rho_{gb}^{(i)}$ с учетом взаимодействия различных механизмов деформирования), что может быть направлением дальнейшего развития модели. Для достижения цели данной работы достаточно ограничиться созданием трехуровневой модели, поэтому для v_{gb0} задана приближенная связь с интенсивностью скорости деформации D_u и размером зерна r : $v_{gb0} = D_u r$. Таким образом, как и для ВДС, учет чувствительности отклика к температуре и скорости деформации осуществляется в уравнениях для изменения критических напряжений $\tau_{cgb}^{(i)}$.

Так как в модели явным образом описывается смена соседних зерен при ЗГС, касательные напряжения $\tau_{gb}^{(i)}$, связанные с границей, определяются следующим образом:

$$\tau_{gb}^{(i)} = \sigma_{gb} : \mathbf{b}_{gb}^{(i)} \mathbf{n}_{gb}^{(i)},$$

$$\sigma_{gb} = (\gamma_{\max} - \gamma_{gb}) / \gamma_{\max} \frac{\sigma_A + \sigma_B}{2} + \gamma_{gb} / \gamma_{\max} \frac{\sigma_C + \sigma_D}{2}, \quad (6.2.8)$$

где σ_{gb} – напряжение для рассматриваемой границы (индекс опущен), γ_{\max} – максимальный сдвиг, при котором сменяются составляющие границу зерна (исходно оставляющие границу зерна A и B теряют контакт), γ_{gb} – текущее значение сдвига по всем СС ЗГС для данной границы, $\gamma_{gb} = \sqrt{(\gamma_{gb}^{(1)} - \gamma_{gb}^{(3)})^2 + (\gamma_{gb}^{(2)} - \gamma_{gb}^{(4)})^2}$, $\gamma_{gb}^{(i)}$ – сдвиги по СС ЗГС для данной границы ($\mathbf{b}_{gb}^{(3)} = -\mathbf{b}_{gb}^{(1)}$, $\mathbf{b}_{gb}^{(4)} = -\mathbf{b}_{gb}^{(2)}$). При $\gamma_{gb} = 0$ напряжение для границы определяется средним напряжением для зерен A и B , при $\gamma_{gb} = \gamma_{\max}$ – средним напряжением в новых граничащих зернах C и D . Принимается, что направление скорости сдвига по границе (зерна, которые сменяют исходные) можно определить на начальном этапе ЗГС по границе с учетом взаиморасположения зерен в пространстве (вообще говоря, вследствие статистичности модели можно «сменяющие» зерна назначить и произвольными, кроме тех, которые уже имеют общие границы с «начальными»).

Значение максимально достижимого до смены зерен сдвига γ_{\max} задается следующим образом:

$$\gamma_{\max} = \left(l_{gb} / \frac{(h_A + h_B)}{2} \right) v/V \approx l_{gb} S_{gb} / V, \quad (6.2.9)$$

где v – средний объем зерна. Когда суммарный сдвиг в границе достигает (6.2.9), сдвиги $\gamma_{gb}^{(i)}$ по СС ЗГС рассматриваемой границы аннулируются, происходит смена составляющих границу зерен, изменяются критические напряжения ЗГС (подробное описание приведено ниже).

Неупругая составляющая скорости деформации за счет реализации ЗГС \mathbf{Z}_{gb}^{in} определяется по скоростям сдвигов ЗГС (6.2.7):

$$\mathbf{Z}_{gb}^{in} = \sum_{i=1}^{4K_{gb}} \dot{\gamma}_{gb}^{(i)} \mathbf{b}_{gb}^{(i)} \mathbf{n}_{gb}^{(i)}. \quad (6.2.10)$$

Закон изменения критических напряжений ЗГС

При описании ЗГС соотношениями (6.2.7)–(6.2.10) внутренними переменными, регулирующими его реализацию, выступают критические напряжения $\tau_{cgb}^{(i)}$, $i = 1, 2, \dots, 4K_{gb}$ (индекс номера СС ЗГС далее опускается), поэтому кинетическое уравнение для их изменения – важнейший элемент модели. Представим его в следующем виде:

$$\dot{\tau}_{cgb} = f_1 + f_2 + f_3 + f_4, \quad (6.2.11)$$

где f_1 характеризует скорость повышения критических напряжений из-за сопротивления соседних зерен при реализации ЗГС и из-за выхода растворенных частиц на границы при динамической рекристаллизации; f_2 связано с механическим выглаживанием границ; f_3 описывает повышение энергии границ вследствие притока РД; f_4 характеризует влияние процессов зернограницной диффузии (диффузионная «подстройка» границ); слагаемые f_2 , f_3 , f_4 являются разупрочняющими.

Повышение критических напряжений за счет интрузии при реализации ЗГС и выхода внедренных частиц на границы описывается слагаемым:

$$f_1 = h \dot{\gamma}_{gb}, \quad (6.2.12)$$

где коэффициент упрочнения h зависит от характеристик зеренной структуры (среднего размера и средней вытянутости), $\dot{\gamma}_{gb}$ – скорость сдвига в СС ЗГС. В ходе динамической рекристаллизации зерна увеличиваются и принимают близкую к шаровой форму, сопротивление такой структуры материала ЗГС становится меньшим по сравнению с начальным. С другой стороны, на первой и второй стадиях СПД испытания при рекристаллизации растворенные частицы выходят на границы зерен, что вносит вклад в увеличение сопротивления ЗГС (на заключительной стадии этот процесс прекращается, наличие частиц на границах является сдерживающим фактором для дальнейшей рекристаллизации). Указанные факторы учитываются определением коэффициента упрочнения h в виде:

$$h = \begin{cases} h_0, & H_{33} \leq H_0, \\ h_0 + (h_F - h_0) (H_{33} - H_0) / (H_F - H_0), & H_0 < H_{33} < H_F, \\ h_F, & H_{33} \geq H_F, \end{cases}$$

где h_0 – значение до начала рекристаллизации, h_F – значение после ее окончания, H_{33} – текущее значение продольной компоненты тензора деформации Генки, H_0, H_F – известные из эксперимента ее значения при начале и конце процесса рекристаллизации.

Вследствие контактного взаимодействия граничащих зерен осуществляется механическое выглаживание, приводящее к понижению критических напряжений ЗГС, что учитывается в слагаемом:

$$f_2 = -\beta \sigma_{nn} \sum_{k=1}^4 |\dot{\gamma}_{gb}^{(k)}| H(\sigma_{nn}) + \phi |\sigma_\tau| (\gamma_{\max} - \gamma_{gb}), \quad (6.2.13)$$

где $\sigma_{nn} = -\mathbf{n}_{gb} \cdot \boldsymbol{\sigma}_{gb} \cdot \mathbf{n}_{gb}$ – давление на границе, $\dot{\gamma}_{gb}^{(k)}$ – скорости сдвигов в границе (для 4 различных СС ЗГС в ней), σ_τ – величина касательной составляющей вектора напряжений на границе, γ_{\max} определяется по (6.2.9), β, ϕ – параметры модели. Согласно (6.2.13) принимается, что выглаживание границы осуществляется двумя путями: при осуществлении сдвига при положительном

давлении и в результате уменьшения шероховатости на микроуровне из-за действия касательных напряжений.

Приток РД в границу повышает ее энергию, что приводит к облегчению ЗГС. Это фактор учитывается в законе упрочнения слагаемым:

$$f_3 = - \sum_{j=1}^4 \sum_{k=1}^{K_j} \mu_j g \dot{\gamma}^{(k)(j)} \left(\mathbf{b}^{(k)(j)} \cdot \mathbf{N}^{(k)(j)} \right) H \left(\mathbf{b}^{(k)(j)} \cdot \mathbf{N}^{(k)(j)} \right), \quad (6.2.14)$$

где j – индекс кристаллита, примыкающего к рассматриваемой границе (как и в (6.2.8)); рассматриваются как начально составляющие границу зерна A, B , так и составляющие границу после смены соседей за счет ЗГС зерна C, D); μ_j – весовой коэффициент, равный $(\gamma_{\max} - \gamma_{gb}) / (2\gamma_{\max})$ для зерен A, B и $\gamma_{gb} / (2\gamma_{\max})$ для зерен C, D (таким образом, при вычислении (6.2.14) применяется такая же линейная комбинация, как в (6.2.8)); $\dot{\gamma}^{(k)(j)}$ — скорость сдвига по СС ЗГС k в j -м кристаллите, граничащем с рассматриваемой фасеткой; K_j — число СС ЗГС в j -м зерне; $\mathbf{b}^{(k)(j)}$ — единичный вектор k -й СС ЗГС в j -м кристаллите; $\mathbf{N}^{(k)(j)}$ — внешняя нормаль к границе для j -го кристаллита; g – параметр модели (Па).

Влияние зернограничной диффузии на уменьшение критических напряжений определено слагаемым:

$$f_4^{(i)} = - c \exp \left(- \frac{U_d}{k\theta} \right) \left| \sigma_{bb} / \bar{\sigma} \right|^q, \quad (6.2.15)$$

где $\sigma_{bb} = \left| \mathbf{b}_{gb}^{(i)} \cdot \boldsymbol{\sigma}_{gb} \cdot \mathbf{b}_{gb}^{(i)} \right|$ — нормальное напряжение в направлении $\mathbf{b}_{gb}^{(i)}$, определяемое по характерным напряжениям $\boldsymbol{\sigma}_{gb}$ в границе, взятым по (6.2.8), U_d — энергия активации зернограничной диффузии, k – постоянная Больцмана, $\bar{\sigma}$, c – параметры модели,. Соотношение (6.2.15) задает снижение критического напряжения сдвига ЗГС в результате действия диффузионных процессов: осуществляется диффузионное сглаживание границы, облегчаются диссоциация накопленных в границе ДОН на ЗГД и РД и переползание дислокаций. В [118, 155] обращается внимание на «ускорение зернограничной диффузии при сверхпластичности». В цитируемых работах коэффициент зернограничной диффузии связывается с притоком РД в границу, интенсивность этого процесса

увеличивается при повышении скорости деформации, что приводит границу в более неравновесное (более дефектное) и способствующее ЗГС состояние. В предложенной модели учет зернограницной диффузии и притока решеточных дислокаций в границу осуществляется отдельно (соотношения (6.2.14)–(6.2.15)).

После достижения суммарным сдвигом в границе значения (6.2.8) осуществляется смена составляющих ее зерен, при этом критические напряжения

τ_{cgb} уменьшаются на значение $\int_{t_s}^{t_E} (\chi_1 f_1 + \chi_2 f_2 + \chi_3 f_3 + \chi_4 f_4) dt$, где t_s, t_E –

моменты начала и окончания скольжения граничащих зерен (в момент t_E зерна теряют контакт). Приняты значения $\chi_1 = 0.6, \chi_2 = 0.3, \chi_3 = 0.5, \chi_4 = 0$.

«Сбрасываются» накопленные изменения критических напряжений из-за действия «механических» факторов и притока РД в границы, но учитывается, что сопротивление новому сдвигу по границе со стороны окружения и в результате выхода частиц на поверхность в некоторой степени наследуется ($\chi_1 = 0.6$), определенное выглаживание граничащих поверхностей уже произошло и для вновь составляющих границу зерен ($\chi_2 = 0.3$); ДОН в границе при смене зерен частично сохраняются ($\chi_3 = 0.5$).

Мощность внутреннего теплового источника за счет ЗГС $q_{gb}^{(i)}$ на границе определяется как

$$q_{gb}^{(i)} = \alpha \sigma_{gb}^{(i)} : \sum_{j=1}^4 \dot{\gamma}_{gb}^{(j)} \mathbf{b}_{gb}^{(j)} \mathbf{n}_{gb}^{(j)} / \hat{\rho}, \quad (6.2.16)$$

где напряжения $\sigma_{gb}^{(i)}$ вычисляются по (6.2.8), α – коэффициент выхода тепла, $\hat{\rho}$ – актуальная плотность материала. Так как тепловые источники входят в уравнение теплопроводности краевой задачи для конструкции как объемные источники, в (6.2.16) поверхностные источники приведены к объему.

Важнейшей задачей настоящей работы являлась разработка общей структуры трехуровневой модели, включающей действующие и взаимовлияющие физические механизмы деформирования. В рамках созданной структуры конкретные соотношения могут быть модифицированы путем использования

более полной информации из ФТТ и результатов опытов. В частности, как отмечено выше, в структуру общей модели может быть встроена подмодель для описания динамической рекристаллизации, предложенная в работе формулировка использована для описания СПД испытаний образцов промышленного алюминиевого сплава 1420, когда данные об изменении зеренной структуры известны и были заложены напрямую в конститутивную модель.

Алгоритм реализации предложенной модели основан на алгоритме вычислений базовой модели, изложенном в п.5.1, поэтому ограничимся кратким его описанием. Для каждого зерна и для каждой границы (индексы опущены) выполняются следующие операции на каждом расчетном шаге:

1) вычисление скоростей изменения внутренних переменных мезоуровня и промежуточного уровня:

а) по напряжениям \mathbf{K} , известным на начало шага, находятся касательные напряжения $\tau^{(k)}$ и скорости сдвигов ВДС $\dot{\gamma}^{(k)}$, по напряжениям σ_{gb} , определенным по напряжениям в составляющих границу зернах, вычисляются касательные напряжения $\tau_{gb}^{(i)}$ и скорости сдвигов ЗГС $\dot{\gamma}_{gb}^{(i)}$;

б) находятся неупругая составляющая скорости деформации за счет ВДС \mathbf{z}^{in} (суммированием по всем СС ВДС в зерне) и неупругая составляющая скорости деформации за счет ЗГС \mathbf{Z}_{gb}^{in} (суммированием по всем СС ЗГС);

в) вычисляются скорости изменения критических напряжений ВДС $\dot{\tau}_c^{(k)}$ и ЗГС $\dot{\tau}_{cgb}^{(i)}$ (с использованием найденных скоростей сдвигов ВДС $\dot{\gamma}^{(k)}$ и ЗГС $\dot{\gamma}_{gb}^{(i)}$);

г) вычисляется скорость изменения мезонапряжений (компоненты $\dot{\mathbf{K}}_{ij}^{ПСК}$);

д) находится спин ПСК кристаллита ω (с использованием найденных скоростей сдвигов ВДС $\dot{\gamma}^{(k)}$ и ЗГС $\dot{\gamma}_{gb}^{(i)}$);

2) в случае кинематического нагружения (когда задан $\mathbf{L} = \hat{\mathbf{V}}\mathbf{V}^T$) выполняется переход к п.3; если исследуется одноосное растяжение (сжатие, другое силовое нагружение или нагружение со смешанными условиями), реализуется итерационная процедура, аналогичная приведенной в п.5.1, однако с уравнениями

макроуровня трехуровневой модели (6.2.1) (с учетом деформирования за счет ЗГС Z_{gb}^{in});

3) определение параметров на конец шага путем интегрирования:

а) вычисление тензора напряжений мезоуровня \mathbf{k} ;

б) определение тензора ориентации ПСК \mathbf{o} , ориентации фасеток \mathbf{n}_{gb} ;

в) нахождение остальных внутренних переменных (накопленных градиента деформации \mathbf{f} , сдвигов ВДС $\gamma^{(k)}$ и ЗГС $\gamma_{gb}^{(i)}$, критических напряжений ВДС $\tau_c^{(k)}$ и ЗГС $\tau_{cgb}^{(i)}$; текущий размер зерна и доля рекристаллизованной фазы находятся по текущей деформации вдоль направления удлинения из данных об экспериментах).

После осуществления расчетов для всех кристаллитов и границ находятся все переменные макроуровня, в частности, вычисляются компоненты тензора скорости изменения макронапряжений $\dot{\mathbf{K}}$ в ЛСК, с интегрированием которых определяются компоненты тензора макронапряжений \mathbf{K} , находится тензор ориентации ПСК макроуровня на конец шага. После нахождения значений всех переменных на конец временного шага происходит переход на следующий шаг.

Результаты применения предложенной модели для исследования СПД представительного объема поликристаллического алюминиевого сплава 1420 приведены в п. 6.3.

6.3. Процедура идентификации и анализ результатов моделирования

Представленная в п.6.2 трехуровневая конститутивная модель позволяет описать СПД поликристаллических сплавов. Обратимся к процедуре идентификации параметров модели, затем – к верификации модели и использованию для проведения исследования различных нагружений.

Процедура идентификации параметров модели

Идентификация (и верификация) модели проводилась с привлечением экспериментальных данных для образцов из алюминиевого сплава 1420 [201], подвергаемых одноосному растяжению при температуре 523 К (0.56

гомологической) (кривые растяжения представлены на рис.6.3.1). Отметим, что структура модели позволяет применять ее и для неизотермических процессов.

Проведено моделирование одноосного растяжения вдоль оси OX_3 фиксированной ЛСК с применением алгоритма, описанного выше. Большая часть натуральных испытаний проводится при постоянной скорости движения захватов [161], поэтому в вычислительном эксперименте задавалась снижающаяся скорость деформирования вдоль оси растяжения:

$$D_{33} = \dot{H}_{33} = D_0 / (1 + D_0 t),$$

где D_{33} – компонента тензора скорости деформации \mathbf{D} (симметричной части (транспонированного) градиента скорости перемещений $\mathbf{L} = \overset{об}{\hat{\nabla}} \mathbf{V}^T$), H_{33} – компонента логарифмической меры деформации (тензора Генки, определенного в текущей конфигурации [103]), D_0 – начальная скорость деформации, t – время; заданную скорость деформации можно представить в виде $\dot{H}_{33} = D_0 \exp(-H_{33})$ [72].

Для идентификации использована кривая растяжения при начальной скорости деформирования $D_{0,fix} = 10^{-3} \text{ с}^{-1}$, дополнительно для установления параметра скоростной чувствительности p – показателя степени в определении параметра упрочнения h_0 , входящего в соотношение (6.2.5), – использовались данные только о максимальных напряжениях при скорости деформации 10^{-2} с^{-1} .

При идентификации все параметры были условно разделены на два типа: 1) параметры состояния, 2) параметры управления. Первый тип параметров включает ряд физических и материальных параметров, которые являются либо известными, либо найденными в других (зачастую – экспериментальных) исследованиях, либо определенными с помощью достаточно простых процедур (к примеру, путем использования известных из ФТТ соображений). В предлагаемой трехуровневой модели к параметрам первого вида можно отнести следующие (при рассмотрении изотермических процессов): модули тензора упругих свойств $\pi_{1111}, \pi_{1122}, \pi_{1212}$ [172]; температуру θ , постоянную Больцмана k ; средний размер зерен, изменяющийся в процессе деформирования; начальные критические напряжения ВДС τ_{c0} (как для рекристаллизованных, так и для нерекристаллизованных зерен; эксперименты

подтверждают, что для нерекристаллизованных зерен начальные критические напряжения выше) и ЗГС τ_{cgb0} (на основании экспериментов о том, что ЗГС осуществляется при больших напряжениях по сравнению с ВДС, полагается $\tau_{cgb0} > \tau_{c0}$); скорости внутризеренных сдвигов $\dot{\gamma}_0$ и зернограничных сдвигов $\dot{\gamma}_{gb0}$ в вязкопластических соотношениях модели. Заметим, что при моделировании процессов с изменяющейся температурой необходимо определять часть параметров модели функциями температуры. Для установления значений параметров $\chi_1, \chi_2, \chi_3, \chi_4$, определяющих в рамках модели уменьшение величины критических напряжений τ_{cgb} при достижении суммарного сдвига по границам соседних зерен максимального (предельного) значения, используются приведенные в п.6.2 физические соображения (при расчетах применялись указанные в п.6.2 значения обсуждаемых параметров).

Для определения параметров второго типа (параметров управления) применяется процедура идентификации. Данный тип параметров включает все оставшиеся параметры законов упрочнения для внутризеренных сдвигов ($A, \bar{\tau}, U, \alpha, h_{fixD}$) и зернограничных сдвигов ($h, \beta, \phi, g, \bar{\sigma}, c, U_d, q$), параметры m и n в соотношениях для описания скоростей внутризеренных и зернограничных сдвигов соответственно, параметр χ в подмодели ротации за счет механизма ЗГС. К этому виду можно также отнести и параметр скоростной чувствительности p (более подробно о его определении написано ниже).

Ставится и решается следующая задача оптимизации:

$$\sum_i \left\| \mathbf{K}^{\varepsilon_i}(\mathbf{x}, \mathbf{u}) - \mathbf{K}_*^{\varepsilon_i} \right\| \rightarrow \min \quad (6.3.1)$$

при ограничениях типа равенств, в качестве которых выступают все соотношения трехуровневой модели (6.2.1)–(6.2.16). Необходимо при заданных параметрах состояния \mathbf{x} найти параметры управления \mathbf{u} , которые доставляют минимум функционалу (6.3.1). В (6.3.1) $\mathbf{K}^{\varepsilon_i}$ – напряжение, определенное с помощью разработанной модели, $\mathbf{K}_*^{\varepsilon_i}$ – напряжение, полученное экспериментально, i –

номер точки на кривой растяжения из эксперимента, соотношение $\|\mathbf{T}\| = \sqrt{\mathbf{T}:\mathbf{T}^T}$ определяет норму тензора второго ранга \mathbf{T} .

Важно отметить, что для реализации процедуры идентификации параметров модели значительные возможности дает предварительный физический анализ СПД, позволивший разработать сценарий деформирования [161] (его подробное описание представлено в п.6.1): ключевая роль механизма ВДС на первой стадии деформирования, лидирующая роль механизма ЗГС – в режиме структурной СП, рассеивание текстуры на завершающей стадии). Полученные результаты расчетных экспериментов должны находиться в соответствии с предложенным сценарием. Условия данного сценария можно формально учесть в соотношении (6.3.1) путем добавления штрафных функций, принимающих большие значения в том случае, если не выполняется какое-либо требование по соответствию сценарию при идентификации (для испытания на растяжение с начальной скоростью деформации $D_{0,fix}$). Для того чтобы избежать усложнения численной процедуры рассматривались разные диапазоны значений параметров, установленные в ходе предварительного анализа и оценки соотношений модели (так, чтобы все соотношения являлись значимыми). При осуществлении перебора таких диапазонов рассматривалась близость результатов моделирования и разработанного сценария деформирования – в итоге определялись диапазоны параметров, обеспечивающие соответствие сценарию. Для установления конкретных значений параметров использовалась процедура приближения к экспериментальной кривой растяжения при сохранении требования соответствия сценарию, заключающаяся в численном решении задачи (6.3.1) с помощью метода прямого поиска (Нелдера-Мида) [152].

На завершающем этапе процедуры идентификации определялся параметр скоростной чувствительности p – для этого использовались экспериментальные данные только о максимальных напряжениях при растяжении с начальной скоростью деформирования 10^{-2} с^{-1} (т.е. из опытных данных для этого эксперимента использовалась только одна точка на кривой).

Результаты идентификации

На рис.6.3.1 представлена полученная при применении процедуры идентификации зависимость компоненты Σ_{33} тензора напряжений Коши на макроуровне от продольной компоненты N_{33} меры деформации Генки [140] и соответствующие данные натурального эксперимента [201], проведенного при начальной скорости деформации 10^{-3} с^{-1} (отметим, что на ранее приведенном рис.6.1.1 по оси абсцисс отложена компонента линейной меры деформации). Найденные (в литературных источниках и в ходе вышеприведенной процедуры идентификации) значения параметров модели: упругие модули кристаллитов $\bar{\pi}_{1111} = 106.8 \text{ ГПа}$, $\bar{\pi}_{1122} = 60.4 \text{ ГПа}$, $\bar{\pi}_{1212} = 28.3 \text{ ГПа}$; параметр спина $\chi = 0.1 \text{ (Н} \cdot \text{м)}^{-1}$; параметры подмодели описания ЗГС: $n = 5$, $h_0 = 10^4 \text{ МПа}$, $h_F = 50 \text{ МПа}$, $\beta = 1.5$, $\phi = 1.0 \text{ с}^{-1}$, $g = 30.1 \text{ МПа}$, $c \exp\left(-\frac{U_d}{k\theta}\right) = 0.02 \text{ МПа/с}$, $\bar{\sigma} = 35 \text{ МПа}$, $q = 3$; параметры подмодели описания ВДС: $m = 10$, начальные критические напряжения для рекристаллизованных зерен $\tau_{c0PEK}^{(k)} = 6.5 \text{ МПа}$, нерекристаллизованных – $\tau_{c0HEPEK}^{(k)} = 8 \text{ МПа}$, параметры внутриверенного упрочнения для нерекристаллизованных зерен – $\tau_{\text{sat}} = 108 \text{ МПа}$, $h_{\text{fixD}} = 23 \text{ МПа}$, $D_{0\text{fix}} = 10^{-3} \text{ с}^{-1}$, $a = 2.25$, $p = 0.6$, $A \exp\left(-\frac{U}{k\theta}\right) = 10^{-5} \text{ МПа/с}$, $\bar{\tau} = 40 \text{ МПа}$, $\alpha = 0.01 \text{ с}^{-1}$. При данной начальной скорости деформации испытания принято, что начальный размер рекристаллизованных зерен – 1.2 мкм, конечный размер рекристаллизованных зерен – 2 мкм.

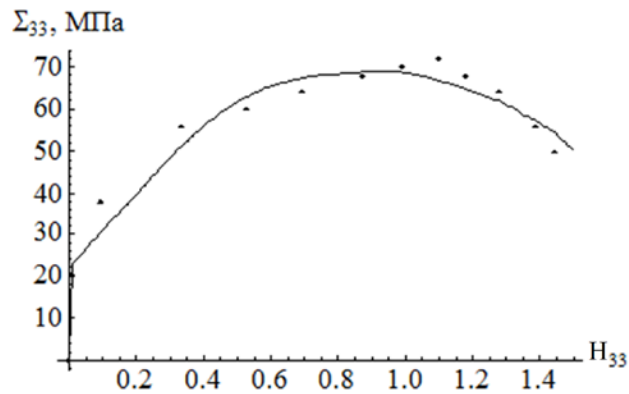


Рис.6.3.1. Зависимость интенсивности напряжений $\Sigma_u = \Sigma_{33}$ от H_{33} , полученная при моделировании и в натуральных испытаниях [201] (значения обозначены точками) на растяжение образцов из сплава 1420 (Al-5.5%Mg-2.2%Li-0.12%Zr) при начальной скорости деформации $D_0 = 10^{-3} \text{ c}^{-1}$

На рис.6.3.1 заметно хорошее качественное соответствие расчетной кривой деформирования натурным данным, наблюдается стадийность. Стоит подчеркнуть, что в трехуровневой конститутивной модели практически отсутствуют параметры (материальные функции), вводимые с явной зависимостью от деформации, это заложено только во внедренном в модель напрямую описании изменения зеренной структуры и в задании параметра упрочнения ЗГС h (п.6.2).

Многоуровневая модель позволяет определять роли механизмов деформирования и изменение структуры в ходе СПД испытания. На рис.6.3.2 представлен график изменения компоненты меры накопленной неупругой деформации за счет ЗГС $M_{33} = \int_0^t (Z_{gb}^{in})_{33} d\tau$. Модель позволяет отслеживать и скоростные характеристики деформирования, на рис.6.3.3 приведены значения компоненты скорости неупругой деформации за счет ЗГС $(Z_{gb}^{in})_{33}$, выведенные через равные промежутки деформации H_{33} .

О наблюдаемом экспериментально возрастании роли ЗГС в процессе испытания говорит увеличение угла наклона графика на рис.6.3.2.

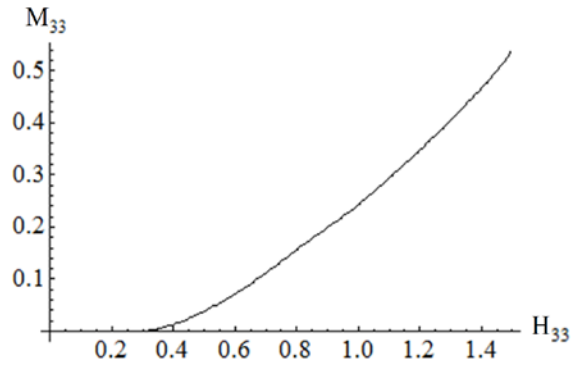


Рис.6.3.2. Изменение компоненты меры накопленной неупругой деформации за

счет ЗГС $M_{33} = \int_0^t (Z_{gb}^{in})_{33} d\tau$ в зависимости от продольной деформации H_{33} при

начальной скорости деформации $D_0 = 10^{-3} \text{ c}^{-1}$

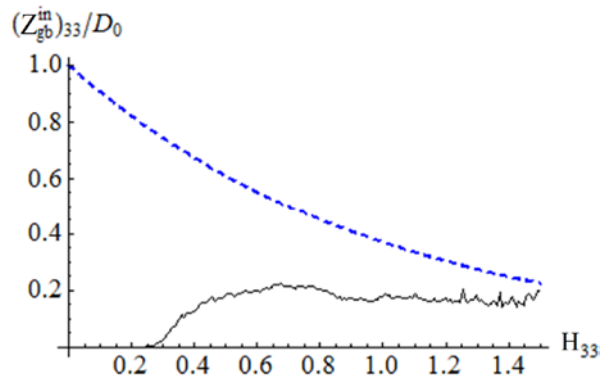


Рис.6.3.3. Значения компонент скорости неупругой деформации за счет ЗГС

$(Z_{gb}^{in})_{33}$, выведенные через равные промежутки деформации H_{33} при начальной скорости деформации $D_0 = 10^{-3} \text{ c}^{-1}$ (штрихованной линией обозначена падающая скорость деформации D_{33})

Отметим, что линию на рис.6.3.3 надо понимать условно: Z_{gb}^{in} меняется на каждом шаге, на графике соединены значения $(Z_{gb}^{in})_{33}$ для шагов через равные промежутки деформации H_{33} . Этот график характеризует «мгновенную долю» ЗГС в соответствующие моменты времени. Наблюдается согласование данных рис.6.3.2 и 6.3.3 – в обоих случаях видно повышение доли ЗГС.

На рис.6.3.4 представлены полюсные фигуры, построенные для начального состояния $H_{33} = 0$, после стадии упрочнения при $H_{33} = 0.9$, а также на третьей стадии при $H_{33} = 1.3$.

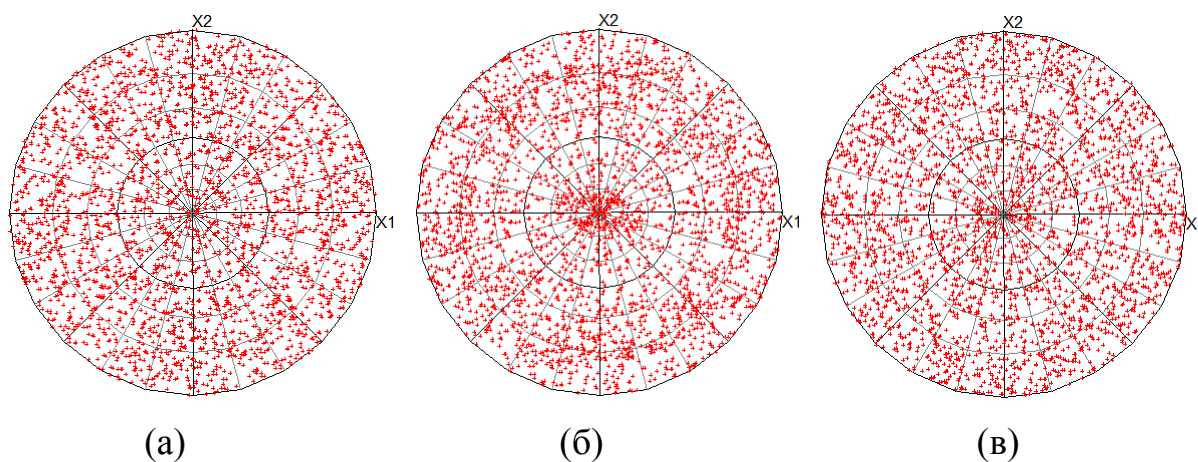


Рис.6.3.4. Прямые полюсные фигуры для направлений $\langle 111 \rangle$ (проецирование с оси OX_3) при начальной скорости деформации $D_0 = 10^{-3} \text{ c}^{-1}$: а) в начальный момент времени, б) после растяжения до $H_{33} = 0.9$, в) после растяжения до $H_{33} = 1.3$

На начальном этапе с доминированием ВДС образуется текстура (рис.6.3.4,б), близкая к текстуре растяжения ГЦК-поликристаллов [183], однако более размытая, что объясняется действием ЗГС; при выходе ЗГС на преобладающую роль на завершающей стадии деформирования происходит наблюдаемое в экспериментах рассеивание текстуры [216, 371].

На рис.6.3.5 построены графики для зависимостей от накопленной деформации интенсивности напряжений в отдельных кристаллитах.

Приведенные на рис.6.3.5 графики подтверждают: доминирование ВДС на первой стадии СПД испытания – активно происходят переходы изображающих точек в пространстве напряжений между вершинами поверхности текучести [129], лидирующую роль ЗГС на завершающей стадии – соседствующие зерна меняются чаще, поэтому более часто меняются мезонапряжения.

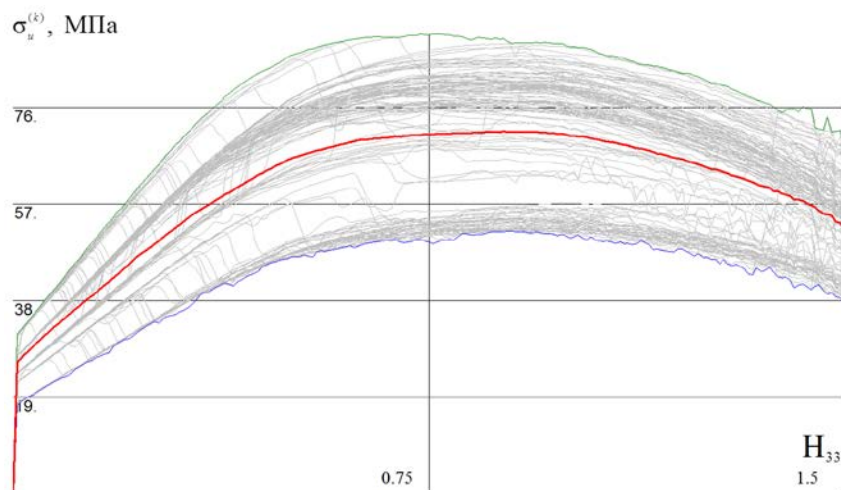


Рис.6.3.5. Изменения интенсивностей напряжений σ_u в отдельных кристаллитах при увеличении H_{33} , полученные при моделировании с начальной скоростью деформации $D_0 = 10^{-3} \text{ с}^{-1}$ (для 100 зерен из ПО макроуровня)

При реализации на макроуровне действительно одноосного нагружения в отдельных кристаллитах все компоненты тензора напряжений могут быть нетривиальными; на рис.6.3.6 приведены определенные в расчете зависимости компонент напряжений мезонапряжений от продольной деформации для случайно выбранных зерен из ПО. Отметим, что с реализацией на мезоуровне неодносного напряженного состояния связано и отличие интенсивности макронапряжений (рис.6.3.5) и средней интенсивности (полужирная кривая посередине рис. 6.3.5); средняя интенсивность мезонапряжений (рис.6.3.5) больше интенсивности макронапряжений (рис.6.3.1).

В окрестности $H_{33}=0.25$ на графике рис.6.3.6(б) можно заметить резкое изменение компонент тензора напряжений из-за перехода изображающей точки в пространстве напряжений из окрестности одной вершины многогранника текучести в окрестность другой вершины [129].

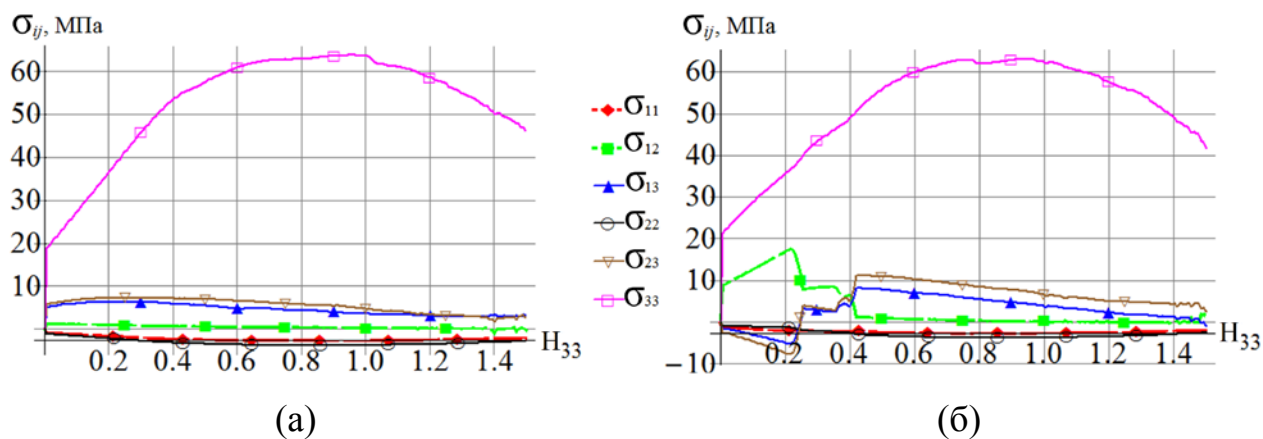


Рис.6.3.6. Изменение компонент напряжений σ_{ij} для двух случайно выбранных зерен из ПО при увеличении продольной деформации H_{33} , полученные при моделировании СПД испытания при начальной скорости деформации $D_0 = 10^{-3} \text{ с}^{-1}$

Результаты верификации и моделирования при различных нагружениях

Для верификации модели использовались данные о СПД испытании с начальной скоростью деформации 10^{-2} с^{-1} . При моделировании применялись вышеприведенные параметры, определенные в процедуре идентификации модели. Параметры для учета динамической рекристаллизации установлены на основе экспериментальных данных: начальный размер рекристаллизованных зерен – 1.2 мкм, конечный размер рекристаллизованных зерен – 1.5 мкм; параметры подмодели описания ЗГС $h_0 = 10^4 \text{ МПа}$, $h_F = 10 \text{ МПа}$ (меньше, чем принятое для при начальной скорости деформации 10^{-3} с^{-1} , так как после рекристаллизации получается более мелкозернистая структура – при повышенной скорости деформации активней ЗГС, чаще происходит смена зерен и они не успевают вырасти более существенно).

На рис.6.3.7 представлена зависимость компоненты Σ_{33} тензора макронапряжений Коши от компоненты H_{33} логарифмической меры, полученная при моделировании, и соответствующие данные эксперимента [201] при начальной скорости деформации 10^{-2} с^{-1} .

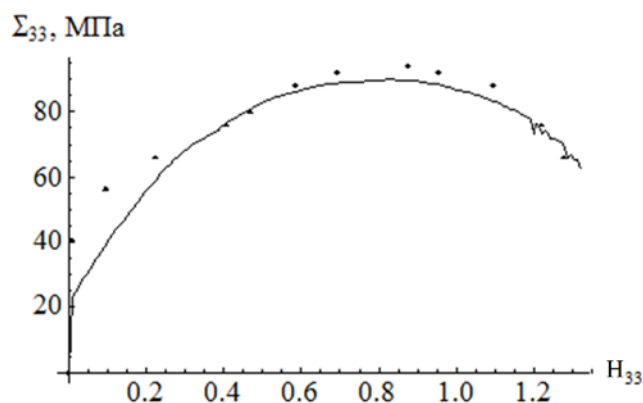


Рис.6.3.7. Изменение интенсивности напряжений $\Sigma_u = \Sigma_{33}$ в зависимости от продольной логарифмической деформации H_{33} , полученное в численных расчетах и в натуральных СПД испытаниях [201] (значения обозначены точками) сплава 1420 (Al-5.5%Mg-2.2%Li-0.12%Zr) при начальной скорости деформации $D_0 = 10^{-2} \text{ c}^{-1}$

Данные рис.6.3.7 указывают на хорошее качественное и удовлетворительное количественное соответствие результатов моделирования и натуральных измерений, в частности, при численных расчетах получено корректное описание стадийности кривой деформирования. Как отмечено выше, в связи со сложностью включения детального физического описания рекристаллизации, в модель введена одна материальная функция (параметр упрочнения h , зависящий от степени деформации) и используется напрямую закладываемое описание изменения зеренной структуры, но остальные параметры – именно параметры материала, а не процесса деформирования. В связи с этим для идентификации необходимо было привлечь всю известную экспериментальную информацию (в частности, рассматривать всю кривую). Поскольку, к сожалению, для проводимых СПД испытаний не найдены точные экспериментальных данных о начальных долях рекристаллизованной и нерекристаллизованной фаз, начальных критических напряжениях, для их задания осуществляется приближенная оценка с привлечением имеющихся экспериментальных данных и соображений ФТТ. С этим может быть связана несколько большая погрешность на начальной стадии.

На рис.6.3.8 приведены графики изменения при деформировании продольной компоненты меры накопленной неупругой деформации за счет ЗГС

$M_{33} = \int_0^t (Z_{gb}^{in})_{33} d\tau$ и компоненты скорости неупругой деформации за счет ЗГС $(Z_{gb}^{in})_{33}$.

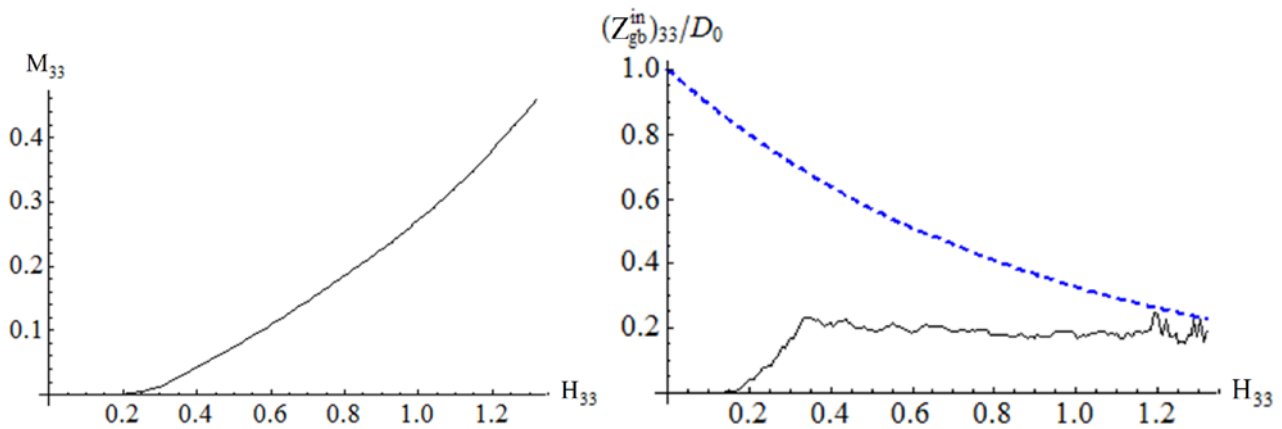


Рис.6.3.8. Зависимость от продольной логарифмической деформации H_{33} результатов моделирования СПД испытания с начальной скоростью деформации $D_0 = 10^{-2} \text{ c}^{-1}$: слева – компонента меры накопленной неупругой деформации за счет ЗГС $M_{33} = \int_0^t (Z_{gb}^{in})_{33} d\tau$, справа – компонента скорости неупругой деформации за счет ЗГС $(Z_{gb}^{in})_{33}$ (значения через равные промежутки деформации H_{33} , падающая общая скорость деформации D_{33} обозначена штрихованной линией)

Результаты на рис.6.3.8 показывают возрастание роли ЗГС – увеличение доли в общей скорости деформации.

На рис.6.3.9 представлены прямые полюсные фигуры для кристаллографических направлений семейства $\langle 111 \rangle$ для различных моментов процесса деформирования. Следует отметить качественное соответствие полюсных фигур, полученных при разных скоростях СПД испытания и изображенных на рис.6.3.9 и 6.3.4.

Полученные численные результаты подтверждают, что созданная модель реализует разработанный на основе анализа экспериментальных данных и описанный в п.6.1 сценарий деформирования при СПД испытании [161]. На первой стадии деформирования происходит упрочнение (рис.6.3.1, 6.3.7) и преобладает механизм ВДС (рис.6.3.2, 6.3.3, 6.3.8), существенны ротации зерен

(рис.6.3.4, 6.3.9), ЗГС малозначимо (рис.6.3.2, 6.3.3, 6.3.8). На второй (переходной) стадии кривая растяжения постепенно изгибается (рис.6.3.1, 6.3.7), увеличивается роль ЗГС (рис.6.3.2, 6.3.3, 6.3.8), реализуется динамическая рекристаллизация (информация об изменении зеренной структуры заложена в модель напрямую). Третья (заключительная) стадия – режим собственно структурной СП характеризуется постепенным снижением напряжения течения (рис.6.3.1, 6.3.7), преобладанием действия механизма ЗГС (рис.6.3.2, 6.3.3, 6.3.8); за счет одновременной реализации ВДС и ротаций зерен зеренная структура остается стабильной. Действие ЗГС обуславливает рассеивание текстуры, создающейся после первой стадии (рис.6.3.4, 6.3.9).

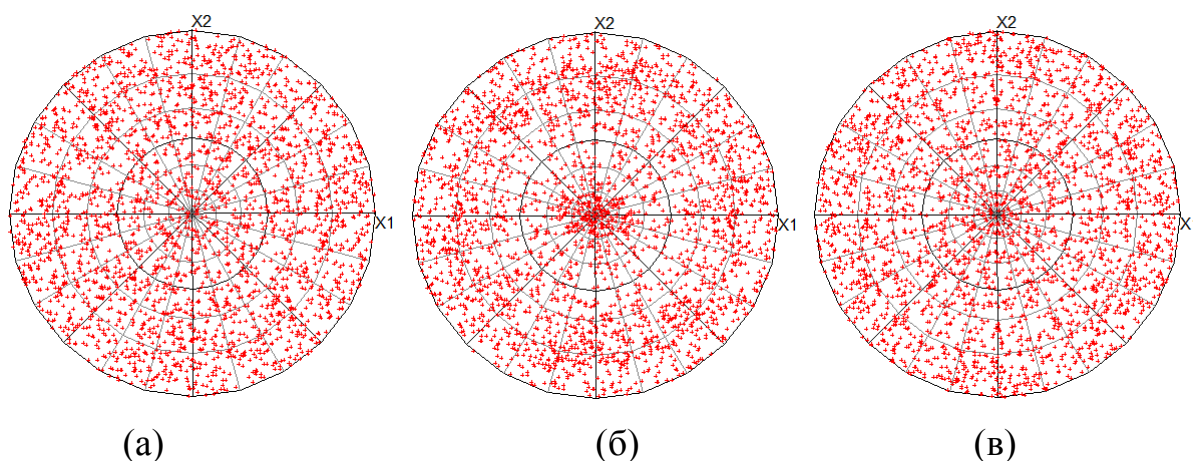


Рис. 6.3.9. Прямые полюсные фигуры для направлений $\langle 111 \rangle$ (проецирование с оси OX_3) при начальной скорости деформации $D_0=10^{-2} \text{ с}^{-1}$: а) в начальный момент времени (равномерное распределение ориентаций), б) после растяжения до $N_{33} = 0.9$, в) после растяжения до $N_{33} = 1.3$

Предложенная конститутивная модель может применяться для исследований произвольных нагружений ПО макроуровня, в том числе – с переходом к режиму СП. К сожалению, автору не удалось найти экспериментальные данные для деформирования в СП-режиме для других видов нагружения, поэтому для иллюстрации возможностей модели далее приводятся результаты численных расчетов без сопоставления с экспериментальными данными.

Рассмотрим кинематическое нагружение простым сдвигом с постоянным транспонированным градиентом скорости перемещений $\mathbf{L} = \hat{\nabla} \mathbf{V}^T = -A \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3$, $A = 10^{-2} \text{ c}^{-1}$. При расчете были использованы такие же значения параметров для описания зеренной структуры, как и приведенные выше для растяжения с $D_0 = 10^{-2} \text{ c}^{-1}$, но с другим определением зависимости для роста зерен и рекристаллизованной фазы: вместо продольной компоненты накопленной деформации, которая применена при моделировании одноосных нагружений, для определения моментов начала и окончания рекристаллизации используется накопленный сдвиг: $N_0 \rightarrow \gamma_0 = 0.2$, $N_F \rightarrow \gamma_F = 0.8$.

На рис.6.3.10 представлены изменения интенсивности напряжений и компонент тензора макронапряжений Коши в зависимости от накопленного сдвига.

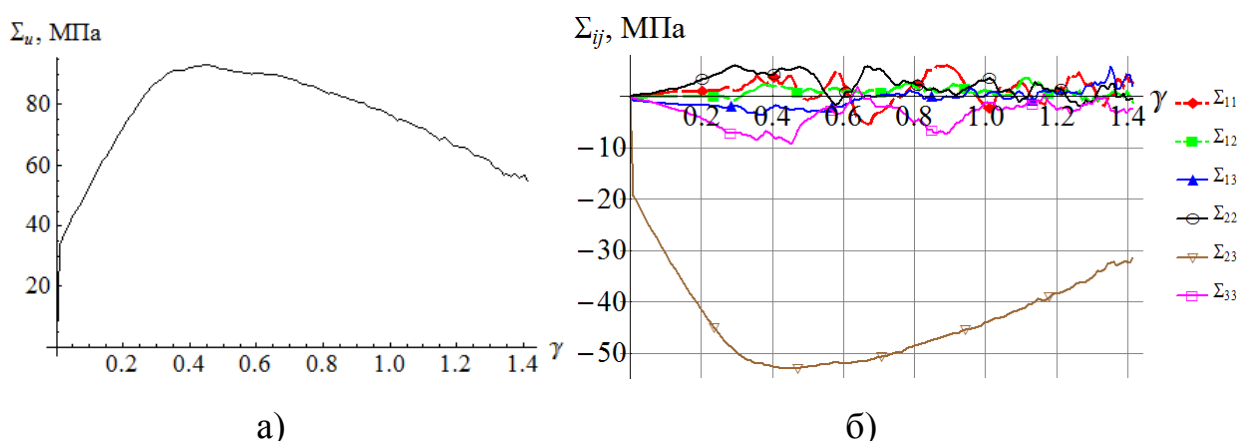


Рис.6.3.10. Изменение интенсивности напряжений (а) и компонент тензора напряжений (б) в зависимости от накопленного сдвига для ПО макрообъема при простом сдвиге

Сдвиговая компонента напряжений является доминирующей (рис.6.3.10), но и другие компоненты тензора напряжений нетривиальны, так как нагружение – кинематическое; «немонотонный» характер графиков вызван появлением растягивающих напряжений в направлении сдвига OX_2 и сжимающих напряжений в перпендикулярном направлении OX_3 на начальном этапе (подобный эффект обсуждается, например, в [103]) и активацией ЗГС со сменой соседствующих

кристаллитов впоследствии, что приводит к определенным колебаниям напряжений.

На рис.6.3.11 приведены графики для характеристик компонент меры накопленной неупругой деформации за счет ЗГС и скорости неупругой деформации за счет ЗГС.

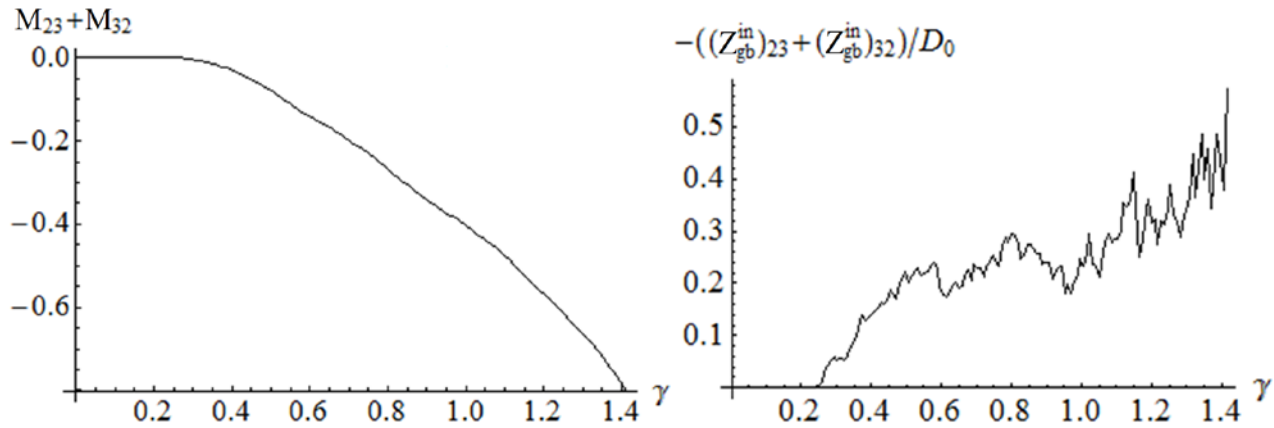


Рис.6.3.11. Зависимость от накопленного сдвига результатов моделирования: слева – суммы компонент меры накопленной неупругой деформации за счет ЗГС

$$(M_{23} + M_{32}) = \int_0^t ((Z_{gb}^{in})_{23} + (Z_{gb}^{in})_{32}) d\tau,$$

справа – суммы компонент скорости неупругой деформации за счет ЗГС

$-((Z_{gb}^{in})_{23} + (Z_{gb}^{in})_{32}) / D_0$, выведенные через равные промежутки накопленного сдвига

Отметим еще раз, что линии на рис.6.3.11 (справа) – условные, поскольку значения скорости неупругой деформации за счет ЗГС меняются на каждом шаге, на графиках соединены значения для находящихся через равные промежутки деформации шагов.

На рис.6.3.12 приведены прямые полюсные фигуры для трех моментов деформирования.

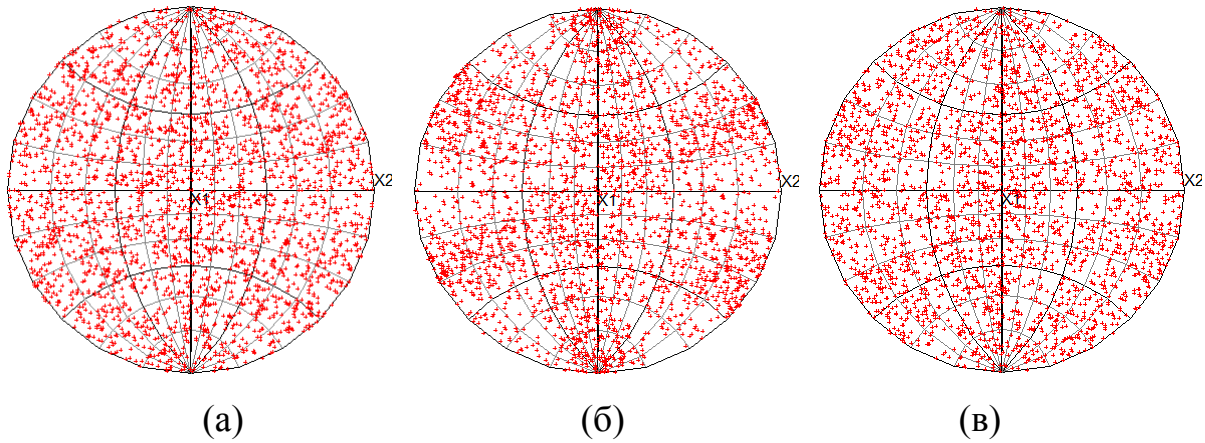


Рис.6.3.12. Прямые полюсные фигуры для направлений $\langle 111 \rangle$ (проецирование с оси Ox_1): а) в начальный момент времени, б) после сдвига $\gamma = 0.9$,
в) после сдвига $\gamma = 1.3$

По данным рис.6.3.12 можно сказать, что модель предсказывает образование текстуры на начальном этапе и ее рассеивание.

В качестве примера применения модели для сложного нагружения рассмотрим деформирование «сдвиг – сдвиг»: на первом этапе до $t = 90$ с реализовывалось нагружение простым сдвигом с постоянным транспонированным градиентом скорости перемещений $\mathbf{L} = \hat{\nabla} \mathbf{V}^T = -A \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3$, на втором – с $\mathbf{L} = \hat{\nabla} \mathbf{V}^T = A \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2$, $A = 10^{-2} \text{ с}^{-1}$. Использовались те же параметры модели, что при проведении расчета для простого сдвига, результаты которого приведены выше.

На рис.6.3.13 представлены изменения интенсивности напряжений и компонент тензора макронапряжений Коши в зависимости от суммарного накопленного сдвига (определяется как сумма сдвигов на этапах). По данным рис.6.3.13 можно отметить совпадение напряжений на первом этапе нагружения с приведенными для соответствующего нагружения простым сдвигом выше. Локальное падение напряжений при смене нагружения вызвано разгрузкой на мезоуровне и более низкими критическими напряжениями сдвига ЗГС для СС ЗГС, которые были неактивны на первом этапе (для них не работает первое слагаемое в законе упрочнения ЗГС) и активируются на втором. Однако достаточно быстро происходит упрочнение, и в целом кривая нагружения очень близка к полученной для сдвигового нагружения (рис. 6.3.10, а), что

свидетельствует о том, что на третьей стадии в силу активности ЗГС материал демонстрирует поведение, близкое к «изотропному».

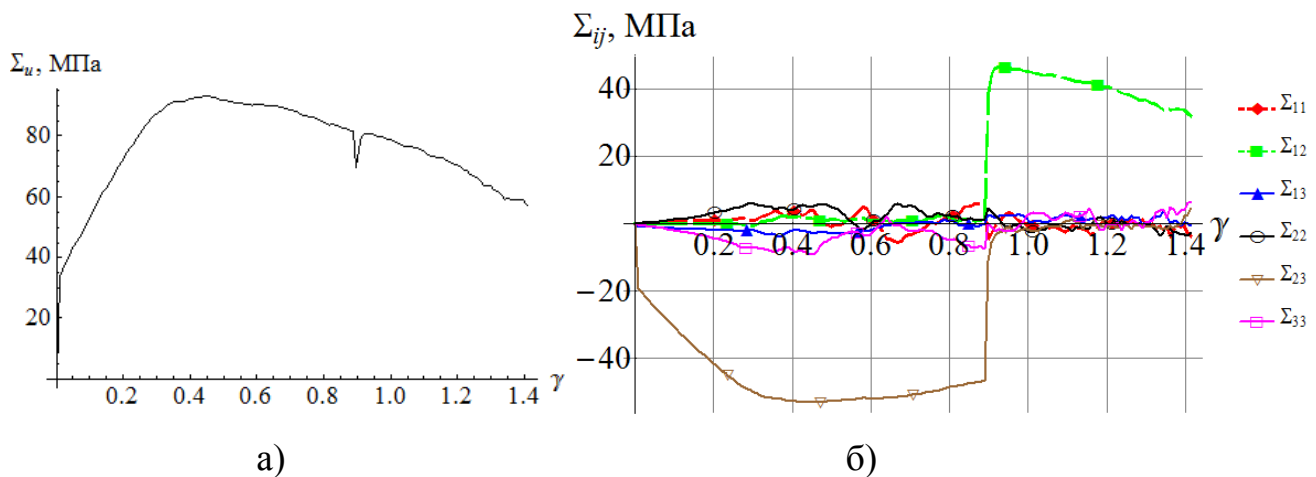


Рис.6.3.13. Изменение интенсивности напряжений (а) и компонент тензора напряжений (б) в зависимости от суммарного накопленного сдвига для ПО макрообъема при двухэтапном нагружении «сдвиг – сдвиг»

На рис.6.3.14 приведены графики для компонент меры накопленной неупругой деформации за счет ЗГС и скорости неупругой деформации за счет ЗГС.

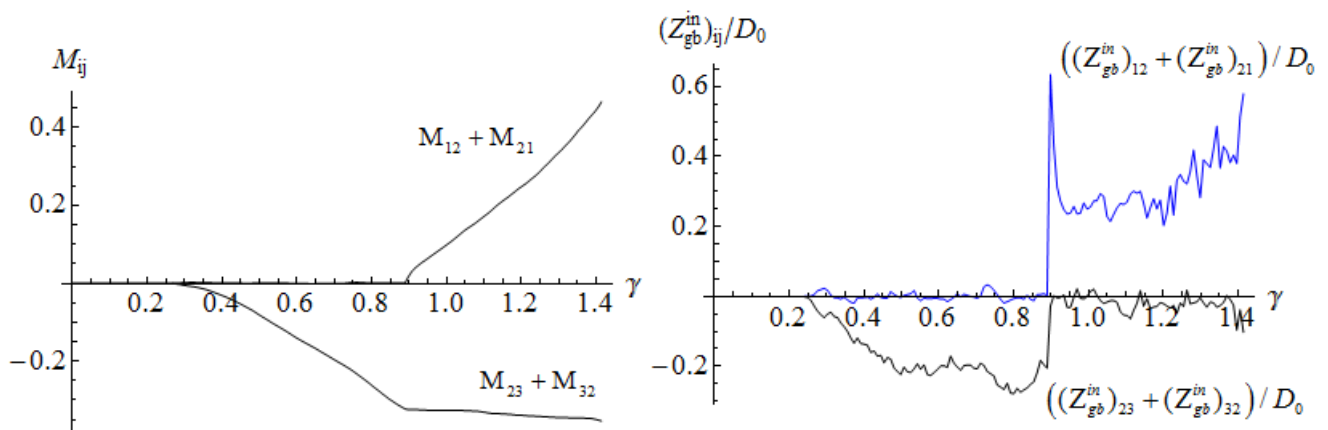


Рис.6.3.14. Зависимость от суммарного накопленного сдвига результатов:

$$\text{слева} - (M_{23} + M_{32}) = \int_0^t ((Z_{gb}^{in})_{23} + (Z_{gb}^{in})_{32}) d\tau \text{ и } (M_{12} + M_{21}) = \int_0^t ((Z_{gb}^{in})_{12} + (Z_{gb}^{in})_{21}) d\tau$$

справа – суммы компонент скорости неупругой деформации за счет ЗГС

$$((Z_{gb}^{in})_{23} + (Z_{gb}^{in})_{32}) / D_0 \text{ и } ((Z_{gb}^{in})_{12} + (Z_{gb}^{in})_{21}) / D_0 \text{ (выведены через равные}$$

промежутки)

На рис.6.3.15 представлены прямые полюсные фигуры для трех моментов деформирования.

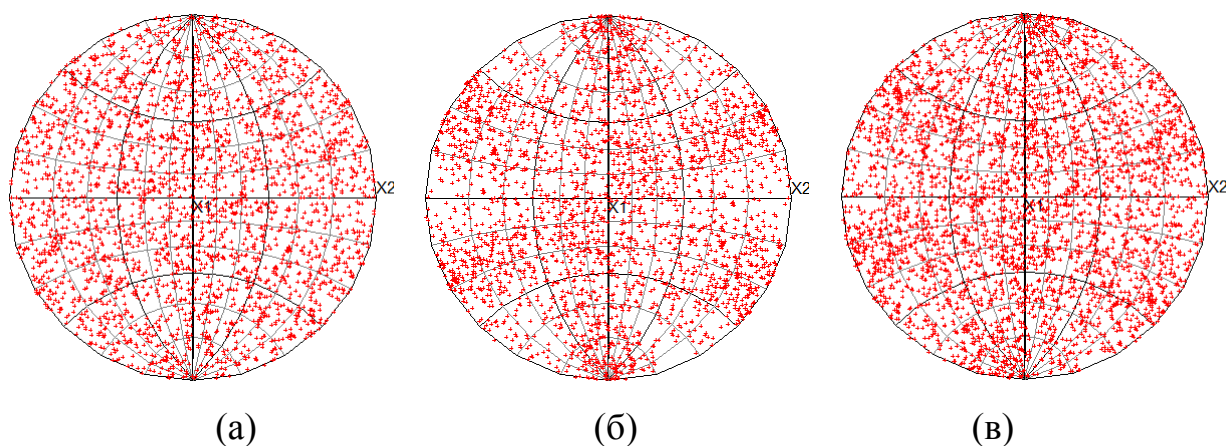


Рис.6.3.15. Прямые полюсные фигуры для направлений $\langle 111 \rangle$ (проецирование с оси Ox_1): а) в начальный момент времени, б) при накопленном сдвиге $\gamma = 0.9$, в) после деформирования на втором участке

По данным рис.6.3.15 можно сказать, что модель предсказывает образование текстуры на начальном этапе и ее рассеивание при дальнейшем деформировании в режиме СПД.

Для демонстрации влияния ЗГС на процесс деформирования был проведен расчет аналогичного нагружения с использованием трехуровневой модели, но с блокировкой возможности ЗГС (были заданы гарантированно недостижимые начальные критические напряжения ЗГС). На рис.6.3.16, 6.3.17 приведены результаты указанного моделирования.

Повышение напряжений после смены нагружения (рис.6.3.16) объясняется активацией более упрочненных СС ВДС (латентное упрочнение превышает активное). Уменьшение интенсивности напряжений связано с рекристаллизацией, после окончания которой материал упрочняется за счет накопления ДОН в границах (достаточно интенсивного в условиях отсутствия ЗГС).

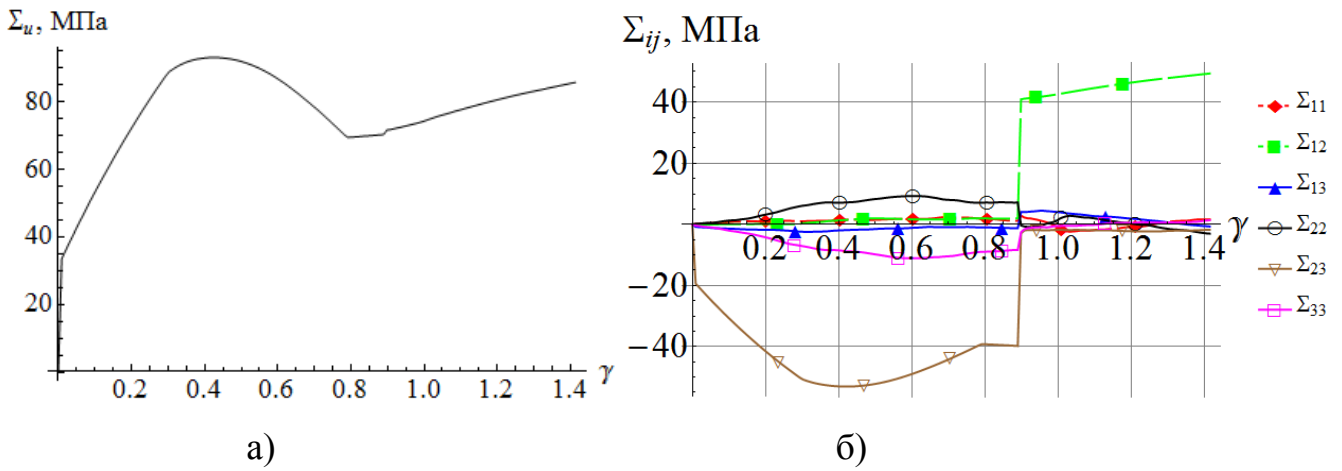


Рис.6.3.16. Изменение интенсивности напряжений (а) и компонент тензора напряжений (б) в зависимости от времени для ПО макроуровня при двухэтапном нагружении «сдвиг – сдвиг» (результаты моделирования без учета ЗГС)

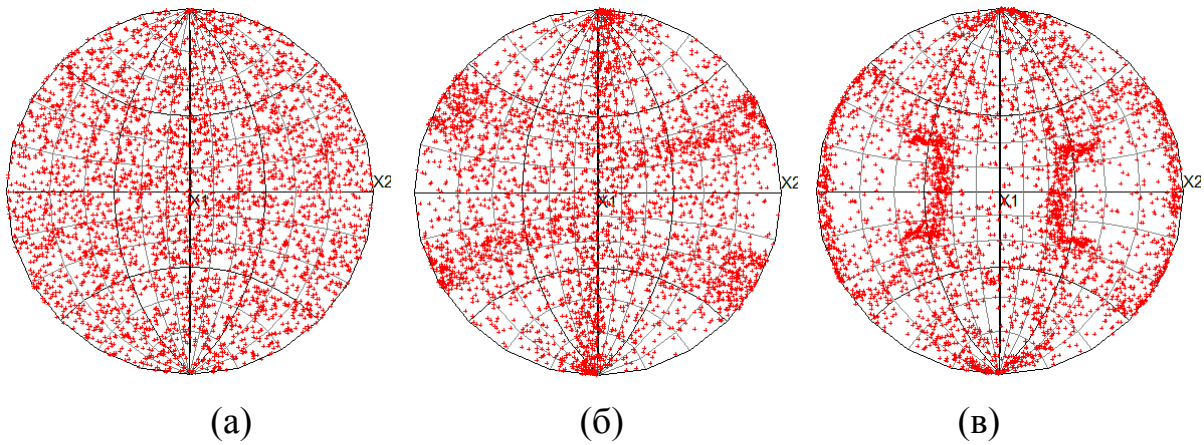


Рис.6.3.17. Прямые полюсные фигуры для направлений <111> (результаты моделирования без учета ЗГС, проецирование с оси OX_1): а) в начальный момент времени, б) при $t=1000$ с, в) после деформирования ($t=2000$ с)

Текстура без действия ЗГС трансформируется, но остается ярко выраженной (рис.6.3.17).

В п.5.3.3 отмечается важный вопрос оценки влияния отклонений параметров модели на изменение отклика, иначе говоря, анализа чувствительности к возмущениям параметров модели. В п.5.3 приведено описание методики оценки чувствительности многоуровневых моделей к возмущениям параметров, основанной на интегральном сопоставлении историй откликов для нескольких видов нагружений при использовании в моделях возмущенных и невозмущенных параметров. В [171] содержатся результаты оценки чувствительности

трехуровневой модели к возмущениям параметров, которые свидетельствуют об удовлетворительной устойчивости модели по отношению к изменению ее параметров.

Таким образом, в данном разделе проиллюстрированы возможности расширенной трехуровневой модели – воспроизведение сложного сценария процесса деформирования в испытаниях на одноосное растяжение с выходом в режим сверхпластичности, что позволяет считать предложенную многоуровневую модель эффективным инструментом для описания различных режимов деформирования и переходов между ними. Этот пример свидетельствует о перспективности развития многоуровневых моделей путем включения в них описания всех значимых механизмов деформирования и их взаимодействий.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Основные результаты и выводы по итогам выполненного исследования

1. В результате проведения аналитического обзора существующих многоуровневых моделей поликристаллических металлов и сплавов, выявлены следующие важные нерешенные вопросы в данной области:

– физически обоснованная формулировка кинематических и определяющих соотношений для анизотропных материалов при неупругом деформировании, особенно – с изменяющимися симметричными свойствами,

– включение в конститутивную модель описания механизма зернограницного скольжения и других для описания сверхпластического деформирования и переходов к нему.

В связи с этим были сформулированы задачи работы, результаты решения которых представлены в следующих пунктах.

2. Осуществлена формулировка новой базовой двухуровневой (мезо- и макроуровень) конститутивной модели для описания упругопластического (упруговязкопластического) деформирования поликристаллических металлов и сплавов, основанная на введении внутренних переменных и кинетических соотношений для них, необходимых для явного описания эволюционирующей структуры материала, эффективных физико-механических свойств и ключевых механизмов деформирования на мезомасштабном уровне.

Система соотношений базовой геометрически и физически нелинейной двухуровневой модели позволяет описывать внутризеренное дислокационное скольжение (упругопластическая и вязкопластическая модели) и ротации решеток кристаллитов.

3. Разработан новый подход к формулировке геометрически и физически нелинейных кинематических и определяющих соотношений многоуровневых конститутивных моделей с учетом симметричных свойств мезоуровня.

Предложено новое представление движения среды на мезоуровне последовательностью пластических деформаций (с неизменным положением кристаллической решетки и связанной с ней подвижной системой координат

(ПСК)), поворота ПСК вместе с материалом и упругого искажения решетки относительно ПСК. При использовании данного разложения движения определяющие соотношения формулируются в «решеточной» разгруженной конфигурации. В силу энергетической сопряженности используемых мер НДС требования отсутствия гистерезиса напряжений и отсутствия диссипации энергии для модели на произвольных замкнутых упругих циклах выполняются автоматически. Предложенная «строгая» формулировка (кинематические и определяющие соотношения) позволяет обоснованно осуществить переход к «приближенной» скоростной формулировке в актуальной конфигурации. Соотношения последней органично встраиваются в постановки краевой задачи в терминах актуальной конфигурации в скоростной форме, удобной для применения численных методов: в этом случае возможно пошаговое решение с переопределением конфигурации расчетной области (в том числе – контактирующих поверхностей). Преимуществом формулировок определяющих соотношений в скоростной форме является также возможность аддитивного разложения скорости неупругой деформации на составляющие от различных механизмов (например, в случае необходимости учета зернограничного скольжения).

4. Созданы алгоритмы реализации предложенных моделей с использованием эффективных численных схем и комплекс программ для ЭВМ. Выполнено исследование поведения представительного объема (макро- и мезоуровня) поликристаллических металлов и сплавов, реализованы процедуры идентификации и верификации моделей, получены новые результаты моделирования различных нагружений моно- и поликристаллов, включая данные об изменении структуры материала и ролей механизмов деформирования.

Впервые проведено аналитическое сопоставление различных формулировок моделей мезоуровня (предложенных и существующих) и сравнение численных результатов моделирования, в том числе – по параметрам, описывающим изменения структуры материала, при использовании различных формулировок моделей мезоуровня. представительного объема (макро- и мезоуровня) поликристаллических металлов и сплавов.

Показано, что известные формулировки дают близкие результаты к получаемым с использованием предложенных моделей, однако именно применение разработанного подхода (п.3) позволяет осуществить физически обоснованную постановку в актуальной конфигурации.

5. Разработана новая методика исследования чувствительности многоуровневых моделей к входным данным (воздействиям, параметрам, начальным условиям).

Для оценки чувствительности модели к возмущению выбранного параметра анализируется влияние характеристик распределения случайного возмущения параметра на характеристики распределения отклонения отклика при возмущенных параметрах от отклика без возмущений параметров. В качестве отклика рассматривается совокупность истории изменения макронапряжений и ориентировок кристаллитов в представительном макрообъеме для набора различных нагружений.

Методика применена для оценки чувствительности предложенных моделей. Результаты свидетельствуют об устойчивости моделей к возмущениям рассмотренных параметров (входных данных): их малые отклонения приводят к малым отклонениям отклика.

6. Базовая модель усовершенствована путем учета всех ключевых механизмов процесса деформирования при расширении диапазона воздействий – создана новая трехуровневая модель поликристаллического материала, способная описывать как режим структурной сверхпластичности, так и переходы к нему.

В результате анализа и консолидации экспериментальных данных, имеющихся в литературе, впервые предложен «сценарий», реализующийся во время одноосного испытания с переходом в режим структурной сверхпластичности. Модель учитывает все значимые механизмы деформирования (внутризеренное дислокационное скольжение, ротации решеток кристаллитов, зернограничное скольжение, динамическую рекристаллизацию, зернограничную диффузию) и их взаимодействие, реализует сценарий деформирования.

Созданы алгоритмы реализации предложенной модели с использованием эффективных численных схем и комплекс программ для ЭВМ. Проведено

исследование процессов простого и сложного нагружения образцов из алюминиевого сплава 1420 с анализом действия различных механизмов деформирования и изменения структуры, результаты удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными.

Информация, представленная в п.2–6, характеризует научную новизну работы.

Совокупность разработанных положений и результатов обеспечила достижение цели исследования – предложено развитие подхода, основанного на введении внутренних переменных, к построению многоуровневых геометрически и физически нелинейных моделей для описания деформирования поликристаллических металлов и сплавов, включающих явное описание изменяющихся структуры материала, определяемых ее состоянием эффективных физико-механических свойств и механизмов деформирования на различных масштабных уровнях и их взаимодействиях, с помощью созданных моделей исследованы закономерности процессов пластического (упругопластического, упруговязкопластического) и сверхпластического деформирования.

Рекомендации и перспективы дальнейшей разработки темы

Предложенные модели могут применяться для исследования процессов неупругого деформирования рассмотренных поликристаллических металлов и сплавов, для других материалов этого класса (при соответствующей идентификации параметров модели), позволяя описывать действие и взаимовлияние различных механизмов и изменение структуры материала. С использованием моделей можно осуществлять анализ как простого, так и произвольного сложного нагружения при больших деформациях.

Созданный аппарат (модели и программы) применим для проведения исследований и совершенствования процессов термомеханической обработки (в частности – с использованием деформирования в режиме структурной сверхпластичности), необходимых для совершенствования существующих и создания новых технологий обработки материалов методами интенсивного деформирования. Двухуровневые модели интегрированы в развиваемый в

коллективе, к которому принадлежит автор, пакет решения краевых задач для описания технологических процессов, планируется соответствующее использование расширенной трехуровневой модели.

Сформулированные соотношения мезоуровня могут использоваться для прямых моделей на базе физических теорий пластичности (с рассмотрением неоднородных полей НДС на мезоуровне).

Предложенный новый подход к формулировке геометрически и физически нелинейных кинематических и определяющих соотношений многоуровневых конститутивных моделей с учетом симметричных свойств мезоуровня может использоваться для создания конститутивных моделей различного типа (например, использующих на мезоуровне вместо упругих соотношений модель Максвелла), применим и для описания материалов других типов с незначительным искажением элементов симметрии при деформировании.

Как перспективы дальнейшей разработки темы диссертационного исследования важными представляются следующие направления, находящиеся за рамками настоящей работы, что отмечено в тексте диссертации: разработка подмоделей для описания измельчения зеренной структуры и рекристаллизации (для описания рекристаллизации при СПД-испытании экспериментальная информация об изменении зеренной структуры закладывается в модель напрямую – п.6.2). Эти задачи являются весьма сложными, их решением занимаются многие коллективы, включая представляемый автором; указанные задачи находятся за рамками настоящей работы, но в перспективе все соответствующие разработки будут объединены в единый комплекс многоуровневых конститутивных моделей материалов, предназначенный для описания полного цикла технологических процессов термомеханической обработки.

Список литературы

1. Аннин Б.Д., Жигалкин В.М. Поведение материалов в условиях сложного нагружения. – Новосибирск: Изд-во СО РАН, 1999. – 342 с.
2. Аннин Б.Д., Коробейников С.Н. Обобщенные сопряженные тензоры напряжений и деформаций // Сибирский журнал индустриальной математики. – 2004. – Т. VII, № 3(19). – С.21–43.
3. Ашихмин В.Н. и др. Введение в математическое моделирование/ Ашихмин В.Н., Гитман М.Б., Келлер И.Э., Наймарк О.Б., Столбов В.Ю., Трусов П.В., Фрик П.Г./ Под ред. П.В.Трусова. – М.: Логос, 2005. – 440 с.
4. Ашихмин В.Н., Волегов П.С., Трусов П.В. Конститутивные соотношения с внутренними переменными: общая структура и приложение к текстурообразованию в поликристаллах //Математическое моделирование систем и процессов. – 2006. – № 14. – С.11–26.
5. Батдорф С.Б., Будянский Б.А. Зависимость между напряжениями и деформациями для упрочняющегося металла при сложном напряженном состоянии// Механика. Сб. переводов. – 1955. – №5. – С.120–127.
6. Батдорф С.Б., Будянский Б.А. Математическая теория пластичности, основанная на концепции скольжения// Механика. Сб. переводов. – 1962. – №1. – С.135–155.
7. Башкирцева И.А., Ряшко Л.Б., Цветков И.Н. Стохастическая чувствительность равновесий и циклов одномерных дискретных отображений // Изв. вузов. Прикладная нелинейная динамика. – 2009. – Т. 17, № 6. – С. 74–85.
8. Беляев С.П. и др. Материалы с эффектом памяти формы. Справ. изд. Под ред. В.А.Лихачева / С.П.Беляев, А.Е.Волков, В.А.Ермолаев, З.П.Каменцева, С.Л.Кузьмин, В.А.Лихачев, В.Ф.Мозгунов, А.И.Разов, Р.Ю.Хайров. В 4-х томах. СПб: Изд-во НИИХ СПбГУ, 1998. – (Т.1 – 424 с., Т.2 – 374 с., Т.3 – 474 с., Т.4 – 268 с.).
9. Бочвар А.А., Свидерская З.А. Явление сверхпластичности в сплавах цинка с алюминием // Изв. АН СССР. ОТН. – 1945. – № 9. – С.821-824.

10. Бровко Г.Л. Определяющие соотношения механики сплошной среды: Развитие математического аппарата и основ общей теории. – М.: Наука, 2017. – 432 с.
11. Быля О.И., Васин Р.А. Деформирование сплавов в режиме сверхпластичности и близких к нему режимах // Известия Тульского государственного университета. Естественные науки. – 2011. – №2. – С.116–128.
12. Валиев Р. З., Александров И. В. Наноструктурные материалы, полученные интенсивной пластической деформацией. — М.: Логос, 2000. — 272 с.
13. Валиев Р.З. Создание наноструктурных металлов и сплавов с уникальными свойствами, используя интенсивные пластические деформации // Российские нанотехнологии. – 2006. – Т. 1, № 1-2. – С. 208-216.
14. Васин Р.А. Об экспериментальном исследовании функционалов пластичности в теории упругопластических процессов // В сб.: Пластичность и разрушение твердых тел. – М.: МГУ, 1988. – С.40–57.
15. Васин Р.А. Свойства функционалов пластичности у металлов, определяемые в экспериментах на двузвенных траекториях деформации // В сб.: Упругость и неупругость. – М.: МГУ, 1987. – С.115–127.
16. Васин Р.А., Еникеев Ф.У. Введение в механику сверхпластичности: В 2-х ч. Ч.1. – Уфа: Гилем, 1998. – 280 с.
17. Вильдеман В.Э., Соколкин Ю.В., Ташкинов А.А. Механика неупругого деформирования и разрушения композиционных материалов. – М.: Физматлит, 1997. – 288 с.
18. Вишняков Я.Д. и др. Теория образования текстур в металлах и сплавах. / Вишняков Я.Д., Бабарэко А.А., Владимиров С.А., Эгиз И.В. – М.: Наука, 1979. – 344 с.
19. Волков А.Е. Микроструктурное моделирование деформации сплавов при повторяющихся мартенситных превращениях // Известия Российской академии наук. Серия физическая. – 2002. – Т. 66, № 9. – С. 1290–1297.
20. Глейтер Г., Чалмерс Б. Большеугловые границы зерен. – М.: Мир, 1975. – 375 с.

21. Грабский М.В. Структурная сверхпластичность металлов. – М.: Metallurgy, 1975. – 272 с.
22. Грязнов М.Ю. и др. Сверхпластичность алюминиевых сплавов системы Al-Li-Mg, полученных методом равноканального углового прессования / Грязнов М.Ю., Чувильдеев В.Н., Кузин В.Е., Мышляев М.М., Копылов В.И. // Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского. – 2011. – №6 (1). – С.49–57.
23. Гуткин М.Ю., Овидько И.А., Скиба Н.В. Зернограничное скольжение и эмиссия решеточных дислокаций в нанокристаллических материалах при сверхпластической деформации // Физика твердого тела. – 2005. – Т.47. – №9. – С.1602–1613.
24. Егорушкин В.Е., Панин В.Е. Масштабная инвариантность пластической деформации планарной и кристаллической подсистем твердых тел в условиях сверхпластичности // Физическая мезомеханика. – 2017. – Т. 20. – № 1. – С. 5–13.
25. Елсукова Т.Ф., Панин В.Е. Влияние масштабных уровней поворотных мод пластического течения на сопротивление деформации поликристаллов // Физическая мезомеханика. – 2009. – Т.12. – №3. – С.5–13.
26. Жермен П. Курс механики сплошных сред. Общая теория. – М.: Высшая школа, 1983. – 399 с.
27. Жилин П.А. Актуальные проблемы механики. Т.1. – СПб.: Издание Института проблем машиноведения РАН, 2006. – 306 с.
28. Жилин П.А. Рациональная механика сплошных сред: Учебн. пособие. – СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2012. – 584 с.
29. Жилиев А.П., Пшеничнюк А.И. Сверхпластичность и границы зерен в ультрамелкозернистых материалах. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2008. – 320 с.
30. Зубчанинов В.Г. Механика сплошных деформируемых сред. – Тверь: Изд-во ТГТУ, Чудо, 2000. – 703 с.
31. Зубчанинов В.Г. Основы теории упругости и пластичности. – М.: Высшая школа, 1990. – 368 с.
32. Ильюшин А.А. Механика сплошной среды. – М.: Изд-во МГУ, 1990. – 310 с.

33. Ильюшин А.А. Пластичность. Основы общей математической теории. – М.: АН СССР, 1963. – 272 с.
34. Ишлинский А.Ю. Общая теория пластичности с линейным упрочнением // Украинский математический журнал. – 1954. – Т. 6. – № 3. – С. 314–325.
35. Ишлинский А.Ю., Ивлев Д.Д. Математическая теория пластичности. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2001; 2003. – 704 с.
36. Кадашевич Ю.И., Мосолов А.Б. Современное состояние эндохронной теории пластичности // Проблемы прочности. – 1991. – № 6. – С. 3–12.
37. Кадашевич Ю.И., Новожилов В.В. Теория пластичности, учитывающая остаточные микронапряжения // Прикладная математика и механика. – 1958. – Т. 22. – Вып. 1. – С. 78–89.
38. Кайбышев О.А. Пластичность и сверхпластичность металлов. – М.: Металлургия, 1975. – 280 с.
39. Кайбышев О.А. Сверхпластичность промышленных сплавов. – М.: Металлургия, 1984. – 264 с.
40. Китаева Д.А., Рудаев Я.И. О макрокинетике динамической сверхпластичности алюминиевых сплавов // Математическое моделирование систем и процессов. – 2005. – №13. – С.115–122.
41. Китаева Д.А., Рудаев Я.И. О пороговом напряжении при сверхпластичности // Журнал технической физики. – 2014. – Т.84, №11. – С.37–40.
42. Китаева Д.А., Рудаев Я.И. Синергетические представления в механике динамической сверхпластичности // Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. – 2013. – Т. 4-1(183). – С.274-283.
43. Койтер В.Т. Моментные напряжения в теории упругости // Механика. Сб. переводов. – 1965. – №3 (91). – С.89–112.
44. Коларов Д., Балтов А., Бончева Н. Механика пластических сред. – М.: Мир, 1979. – 302 с.
45. Кондауров В.И., Никитин Л.В. Теоретические основы реологии геоматериалов. – М.: Наука, 1990. – 207 с.

46. Кондратьев Н.С. Упруговязкопластическая модель для описания деформирования многофазных поликристаллов в неизотермических условиях // Дисс. ...канд. физ.-мат. н. – Пермь, 2014. – 169 с.
47. Кондратьев Н.С., Трусов П.В. Математическая модель для описания деформирования ОЦК–монокристаллов, учитывающая двойникование // Вычислительная механика сплошных сред. – 2011. – Т.4, №4. – С.20–33.
48. Кондратьев Н.С., Трусов П.В. О мере разориентации систем скольжения соседних кристаллитов в поликристаллическом агрегате // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2012. – № 2. – С.112–127.
49. Кондратьев Н.С., Трусов П.В. Описание упрочнения систем дислокационного скольжения за счет границ кристаллитов в поликристаллическом агрегате// Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2012. – № 3. – С.78–97.
50. Кондратьев Н.С., Трусов П.В., Швейкин А.И. Программа для ЭВМ «Реализация двухуровневой модели неупругого деформирования ГЦК-поликристаллов для применения в пакете Abaqus» («Модель ГЦК-поликристалла для Abaqus») // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2013619775 от 14.10.2013 г.
51. Коновалов А.В. Определяющие соотношения для металлов при высокотемпературных пластических деформациях// Известия Российской академии наук. Механика твердого тела. – 2009. – № 1. – С. 116–123.
52. Коробейников С.Н. Нелинейное деформирование твердых тел. – Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2000. – 262 стр.
53. Кривцов А.М. Описание пластических эффектов при молекулярно-динамическом моделировании откольного разрушения // Физика твердого тела. – 2004. – Т.46, № 6. – С. 1025–1030.
54. Кукуджанов В.Н. Связанные модели упругопластичности и поврежденности и их интегрирование // Известия Российской академии наук. Механика твердого тела. – 2006. – № 6. – С. 103–135.

55. Курант Р., Гильберт Д. Методы математической физики. Т.1. – М.–Л.: ГИТТЛ, 1951. – 476 с.
56. Лахтин Ю.М., Леонтьева В.П. Материаловедение: Учебник для высших технических учебных заведений. – 3-е изд., перераб. и доп. – М.: Машиностроение, 1990. – 528 с.
57. Левитас В.И. Большие упругопластические деформации материалов при высоком давлении. – Киев: Наукова думка, 1987. – 232 с.
58. Леонов М.Я. Механика деформаций и разрушения: Физико-математические основы теории. – Фрунзе: Илим, 1981. – 238 с.
59. Линь Т.Г. Физическая теория пластичности // Проблемы теории пластичности. Сер. Новое в зарубежной механике. Вып.7.– М.: Мир, 1976. – С.7–68.
60. Лихачев В.А., Малинин В.Г. Структурно-аналитическая теория прочности. – СПб.: Наука, 1993. – 471 с.
61. Лобанов М.Л. и др. Методы исследования текстур в материалах : учеб.-метод. пособие / М.Л. Лобанов, А.С. Юровских, Н.И. Кардонина, Г.М. Русаков. – Екатеринбург: Изд-во Урал. ун-та, 2014. – 115 с.
62. Ломакин Е.В. Механика сред с зависящими от вида напряженного состояния свойствами // Физ. мезомех. – 2007. – Т. 10, № 5. – С. 41–52.
63. Лубенец С.В. Динамический возврат и кинетика релаксации напряжений в кристаллах при низких и высоких гомологических температурах // Физика твердого тела. –2002. – Т. 44, № 1 . – С. 72–77.
64. Лурье А.И. Нелинейная теория упругости. – М.: Наука, 1980. – 512 с.
65. Лутфуллин Р.Я. Сверхпластичность и твердофазное соединение наноструктурированных материалов. Часть I. Влияние размера зерна на твердофазную свариваемость сверхпластичных сплавов // Письма о материалах. – 2011. – Т.1. – С. 59–64.
66. Мазилкин А.А., Камалов М.М., Мышляев М.М. Структура и фазовый состав сплава Al-Mg-Li-Zr в условиях высокоскоростной сверхпластичности // Физика твердого тела. – 2004. – Т.46, №8. – С. 1416–1421.

67. Макаров П.В. и др. Нелинейная механика геоматериалов и геосред. / Макаров П.В., Смолин И.Ю., Стефанов Ю.П., Кузнецов П.В., Трубицын А.А., Трубицына Н.В., Ворошилов С.П., Ворошилов Я.С./ Отв. ред. Л.Б.Зуев. – Новосибирск: Академическое изд-во «Гео», 2007. – 235 с.
68. Макаров П.В. Моделирование процессов деформации и разрушения на мезоуровне // Изв. РАН. МТТ. – 1999. – №5. – С.109–130.
69. Макаров П.В. Моделирование упругопластической деформации и разрушения неоднородных сред на мезоуровне // Физическая мезомеханика. – 2003. – Т.6, №4. – С.111–124.
70. Макаров П.В. Нагружаемый материал как нелинейная динамическая система. Проблемы моделирования // Физическая мезомеханика. – 2005. – Т.8, №6. – С.39–56.
71. Макаров П.В. Эволюционная природа блочной организации геоматериалов и геосред. Универсальный критерий фрактальной делимости // Геология и геофизика. – 2007. – Т.48, №7. – С.724–746.
72. Малыгин Г.А. Пластичность и прочность микро- и нанокристаллических материалов // Физика твердого тела. – 2007. – Т.49, №6. – С.961–982.
73. Маркин А.А., Соколова М.Ю. Термомеханика упругопластического деформирования. – М.: Физматлит, 2013. – 319 с.
74. Маркин А.А., Соколова М.Ю., Христич Д.В. Процессы упругопластического конечного деформирования. – Тула: Изд-во ТулГУ, 2011. – 374 с.
75. Миндлин Р.Д. Влияние моментных напряжений на концентрацию напряжений // Механика. Сб. переводов. – 1964. – №4 (86). – С.115–128.
76. Можен Ж. Механика электромагнитных сплошных сред. – М.: Мир, 1991. – 560 с.
77. Мохель А.Н., Салганик Р.Л. К теории пластического деформирования упрочняющихся материалов // Изв. АН СССР. МТТ. – 1976. – № 5. – С. 98–111.
78. Мохель А.Н., Салганик Р.Л., Христианович С.А. О пластическом деформировании упрочняющихся металлов и сплавов. Определяющие

- уравнения и расчеты по ним // Изв. АН СССР. МТТ. – 1983. – №4. – С. 119–141.
79. Мулюков Р.Р. и др. Сверхпластичность ультрамелкозернистых сплавов: эксперимент, теория, технологии / Мулюков Р.Р., Имаев Р.М., Назаров А.А., Имаев М.Ф., Имаев В.М. – М.: Наука, 2014. – 284 с.
80. Наймарк О.Б. Коллективные свойства ансамблей дефектов и некоторые нелинейные проблемы пластичности и разрушения // Физическая мезомеханика. – 2003. – Т. 6, № 4. – С. 45–72.
81. Наймарк О.Б. О порообразовании, уравнениях состояния и устойчивости сверхпластического деформирования материалов // ЖПМТФ. – 1985. – №4. – С.144–150.
82. Наймарк О.Б., Ладыгин О.В. Неравновесные кинетические переходы в твердых телах как механизмы локализации пластической деформации // ЖПМТФ. – 1993. – №3. – С.57–61.
83. Нечаева Е.С., Трусков П.В. Конститутивная модель частично кристаллического полимерного материала. Алгоритм реализации модели мезоуровня // Вычислительная механика сплошных сред. – 2011а. – Т.4, №1. – С.74–89.
84. Нечаева Е.С., Трусков П.В. Конститутивная модель частично кристаллического полимерного материала. Алгоритм реализации для представительного объема макроуровня // Вычислительная механика сплошных сред. – 2011б. – Т.4, №2. – С. 82–95.
85. Новиков И.И. Дефекты кристаллического строения металлов. – М.: Изд-во Металлургия, 1975. – 208 с.
86. Новиков И.И., Портной В.К. Сверхпластичность сплавов с ультрамелким зерном. – М.: Металлургия, 1981. – 168 с.
87. Новожилов В.В., Кадашевич Ю.И. Микронапряжения в конструкционных материалах. – Л.: Машиностроение, 1990. – 223 с.
88. Нурисламова Л.Ф., Губайдуллин И.М. Редукция детальных схем химических превращений окислительных реакций формальдегида и водорода на основании результатов анализа чувствительности математической модели //

Вычислительные методы и программирование. – 2014. – Т. 15, № 4. – С. 685–696.

89. Орлов А.Н. Введение в теорию дефектов в кристаллах. – М.: Высшая школа, 1983. – 144 с.
90. Орлов А.Н. Границы зерен в металлах. – М.: Metallurgia, 1980. – 156 с.
91. Пальмов В.А. Колебания упруго-пластических тел. – М.: Наука; Гл. ред. физ.-мат. лит-ры, 1976. – 328 с.
92. Панин В.Е. и др. Структурные уровни деформации твердых тел / Панин В.Е., Гриняев Ю.В., Елсукова Т.Ф., Иванчин А.Г. // Изв. вузов. Физика. – 1982. – №6. – С.5–27.
93. Панин В.Е. и др. Структурные уровни пластической деформации и разрушения/ В.Е.Панин, Ю.В.Гриняев, В.И.Данилов и др. – Новосибирск: Наука, 1990. – 255 с.
94. Панин В.Е. и др. Физическая мезомеханика и компьютерное конструирование материалов: В 2-х т., Т.1/ В.Е.Панин, В.Е.Егорушкин, П.В.Макаров и др. – Новосибирск: Наука. Сибирская издат. фирма РАН, 1995.– 298 с.
95. Панин В.Е. и др. Физическая мезомеханика и компьютерное конструирование материалов: В 2-х т., Т.2/ В.Е.Панин, П.В.Макаров, С.Г.Псахье и др. – Новосибирск: Наука. Сибирская издат. фирма РАН, 1995. – 320 с.
96. Панин В.Е. Новая область физики твердого тела // Изв. вузов. Физика. – 1987. – Т.30, №1. – С. 3–8.
97. Панин В.Е. Основы физической мезомеханики // Физическая мезомеханика.– 1998.– Т.1, №1. – С.5–22.
98. Панин В.Е., Гриняев Ю.В. Физическая мезомеханика – новая парадигма на стыке физики и механики // Физическая мезомеханика. – 2003.– Т.6, №4. – С. 9–36.
99. Панин В.Е., Егорушкин В.Е. Основы физической мезомеханики пластической деформации и разрушения твердых тел как нелинейных иерархически организованных систем // Физическая мезомеханика. – 2015. – Т.18, №5. – С.100–113.

100. Панин В.Е., Егорушкин В.Е., Елсукова Т.Ф. Физическая мезомеханика зернограничного скольжения в деформируемом поликристалле // Физическая мезомеханика.– 2011. – Т.14, №6. – С. 15–22.
101. Панин В.Е., Лихачев В.А., Гриняев Ю.В. Структурные уровни деформации твердых тел. – Новосибирск: Наука, сиб. отд-ние, 1985. – 229 с.
102. Поздеев А.А., Няшин Ю.И., Трусков П.В. Остаточные напряжения: теория и приложения. – М.: Наука, 1982. – 112 с.
103. Поздеев А.А., Трусков П.В., Няшин Ю.И. Большие упругопластические деформации: теория, алгоритмы, приложения. – М.: Наука, 1986. – 232 с.
104. Полухин П.И., Горелик С.С., Воронцов В.К. Физические основы пластической деформации. – М.: Металлургия, 1982 – 584 с.
105. Псахье С.Г., Остермайер Г.П., Дмитриев А.И., Шилько Е.В., Смолин А.Ю., Коростелев С.Ю. Метод подвижных клеточных автоматов как новое направление дискретной вычислительной механики. I. Теоретическое описание // Физическая мезомеханика. – 2000. – Т. 3, № 2. – С. 5-13.
106. Пшеничнюк А.И., Кайбышев О.А., Астанин В.В. О возможности использования физических моделей при построении определяющих соотношений сверхпластичности // Математическое моделирование систем и процессов, №6. – 1998. – С. 92-98.
107. Пшеничнюк А.И., Кайбышев О.А., Астанин В.В. Природа крупномасштабного течения как отличительный признак сверхпластичности // Физика твердого тела. – 1997. – Т.39. – №12. – С.2179–2185.
108. Роговой А.А. Определяющие соотношения для конечных упруго-неупругих деформаций // Прикладная механика и техническая физика. – 2005. – Т.46, №5. – С.138–149.
109. Роговой А.А. Термодинамика упруго-неупругого процесса при конечных деформациях // Прикладная механика и техническая физика. – 2007. – Т.48, № 4. – С. 144–153.
110. Роговой А.А. Термоупругопластические процессы с конечными деформациями// Вычислительная механика сплошных сред. – 2013. – Т. 6, № 3. – С. 373-383.

111. Романова В.А. и др. Микромеханическая модель эволюции деформационного рельефа в поликристаллических материалах / Романова В.А., Балахонов Р.Р., Панин А.В., Батухтина Е.Е., Казаченок М.С., Шахиджанов В.С. // Физическая мезомеханика. – 2017. – Т.20, №3. – С.81–90.
112. Романова В.А. и др. О решении квазистатических задач микро- и мезомеханики в динамической постановке / Романова В.А., Балахонов Р.Р., Батухтина Е.Е., Емельянова Е.С., Сергеев М.В. // Физическая мезомеханика. – 2018. – Т.21, №2. – С.68–79.
113. Рудской А.И., Рудаев Я.И. Механика динамической сверхпластичности алюминиевых сплавов. – СПб.: Наука, 2009. – 218 с.
114. Русинко К.Н. Теория пластичности и неустановившейся ползучести. – Киев: Вища школа, 1981. – 148 с.
115. Рыбин В.В. Большие пластические деформации и разрушение металлов. – М.: Металлургия, 1986. – 224 с.
116. Рыбин В.В. Закономерности формирования мезоструктур в ходе развитой пластической деформации // Вопросы материаловедения.– 2002. – №1(29). – С. 11–33.
117. Рыбин В.В., Перевезенцев В.Н., Свирина Ю.В. Физическая модель начальных стадий фрагментации поликристаллов в ходе развитой пластической деформации // Физика металлов и металловедение. – 2017. – Т. 118, № 12. – С. 1243–1247.
118. Сахаров Н.В. и др. Эффект ускорения зернограницной диффузии при сверхпластичности нано и микрокристаллических сплавов / Сахаров Н.В., Чувильдеев В.Н., Грязнов М.Ю., Нохрин А.В., Копылов В.И., Пирожникова О.Э., Лопатин Ю.Г., Мелёхин Н.В. // Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского. – 2010. – №5(2). – С.167–170.
119. Сегал В. М. и др. Пластическая обработка металлов простым сдвигом / В. М. Сегал, В. И. Резников, А. Е. Дробышевский, В. И. Копылов // Известия АН СССР. Металлы. 1981. №1. – С. 115-120.
120. Седов Л.И. Механика сплошной среды. Т.2. – М.: Наука, 1970. – 568 с.

121. Смирнов О.М., Тулупов С.А., Цепин М.А., Лисунец Н.Л., Бегнарский В.В., Нгуен Ч.А. Реологические модели как основной элемент моделирования процессов обработки металлов давлением // Вестник МГТУ им. Г.И. Носова. – 2008. – №2. – С.45–52.
122. Соболев И.М. Глобальные показатели чувствительности для изучения нелинейных математических моделей // Мат. моделирование. – 2005. – Т. 17, № 9. – С. 43–52.
123. Ташкинов М.А., Вильдеман В.Э., Михайлова Н.В. Метод последовательных приближений в стохастической краевой задаче теории упругости структурно-неоднородных сред // Механика композиционных материалов и конструкций. – 2010. – Т. 16, № 3. – С. 369–383.
124. Трусделл К. Первоначальный курс рациональной механики сплошных сред. – М.: Мир, 1975. – 592 с.
125. Трусов П.В. Некоторые вопросы нелинейной механики деформируемого твердого тела // Вестник ПГТУ. Мат. моделир. систем и процессов. – 2009. – №17. – С.85–95.
126. Трусов П.В., Ашихмин В.Н., Волегов П.С., Швейкин А.И. Моделирование эволюции структуры поликристаллических материалов при упругопластическом деформировании// Ученые записки Казанского университета. Физико-математические науки. – 2010. – Т.152, №4. – С. 225–237.
127. Трусов П.В., Ашихмин В.Н., Волегов П.С., Швейкин А.И. Определяющие соотношения и их применение для описания эволюции микроструктуры // Физическая мезомеханика. – 2009. – Т.12, №3. – С. 61–71. (*переводная – Trusov P.V., Ashikhmin V.N., Volegov P.S., Shveykin A.I. Constitutive relations and their application to the description of microstructure evolution// Physical Mesomechanics. – 2010. – Vol.13, Iss.1-2. – Pp. 38–46.*)
128. Трусов П.В., Ашихмин В.Н., Швейкин А.И. Анализ деформирования ГЦК-металлов с использованием физической теории упругопластичности // Физическая мезомеханика. – 2010. – Т. 13, №3. – С. 21–30. (*переводная – Trusov P.V., Ashikhmin V.N., Shveykin A.I. Physical elastoplastic analysis of*

deformation of fcc metals // Physical Mesomechanics. – 2011. – Vol. 14, Iss.1-2. – Pp. 40–48.)

129. Трусов П.В., Ашихмин В.Н., Швейкин А.И. Двухуровневая модель упругопластического деформирования поликристаллических материалов // Механика композиционных материалов и конструкций. – 2009. – Т.15, №3. – С. 327–344.
130. Трусов П.В., Волегов П.С. Физические теории пластичности: теория и приложения к описанию неупругого деформирования материалов. Ч.1. Жесткопластические и упругопластические модели // Вестник ПГТУ. Механика. – 2011. – №.1. – С.5–45.
131. Трусов П.В., Волегов П.С. Физические теории пластичности: теория и приложения к описанию неупругого деформирования материалов. Ч.2. Вязкопластические и упруговязкопластические модели // Вестник ПГТУ. Механика. – 2011. – №.2. – С.101–131.
132. Трусов П.В., Волегов П.С. Физические теории пластичности: теория и приложения к описанию неупругого деформирования материалов. Ч.3. Теории упрочнения, градиентные теории // Вестник ПГТУ. Механика. – 2011. – №.3. – С.146–197.
133. Трусов П.В., Волегов П.С., Янц А.Ю. Двухуровневые модели поликристаллов: приложение к оценке справедливости постулата изотропии Ильюшина в случае больших градиентов перемещений // Физическая мезомеханика. – 2015. – Т. 18, №1. – С. 23–37.
134. Трусов П.В., Волегов П.С., Янц А.Ю., Двухуровневые модели поликристаллов: приложение к анализу сложного нагружения // Физическая мезомеханика. – 2013. – Т. 16, №6. – С. 43–50.
135. Трусов П.В., Келлер И.Э. Теория определяющих соотношений. Ч.1. Общая теория. – Пермь: Изд-во Перм. гос. техн. ун-т, 2006. – 173 с.
136. Трусов П.В., Кондратьев Н.С. Двухуровневая упруговязкопластическая модель: применение к анализу эволюции зеренной структуры при статической рекристаллизации// Физическая мезомеханика. – 2018. – Т.21, №2. – С.21–32.

137. Трусов П.В., Кондратьев Н.С., Швейкин А.И. О геометрически нелинейных определяющих соотношениях упругого материала// Вестник ПНИПУ. Механика. – 2015. – № 3. – С.182–201.
138. Трусов П.В., Нечаева Е.С., Швейкин А.И. Применение несимметричных мер напряженного и деформированного состояния при построении многоуровневых конститутивных моделей материалов// Физическая мезомеханика. – 2013. – Т. 16, №2. – С. 15–31.
139. Трусов П.В., Столбов В.Ю. Об одном алгоритме решения пространственных задач установившегося течения металла // Изв. АН СССР. Металлы. – 1983. – №4. – С.134–138.
140. Трусов П.В., Шарифуллина Э.Р., Швейкин А.И. Многоуровневая модель для описания пластического и сверхпластического деформирования поликристаллических материалов // Физическая мезомеханика. – 2019. – №2. – С.5–23. (*переводная – Trusov P.V., Sharifullina E.R., Shveykin A.I. Multilevel model for the description of plastic and superplastic deformation of polycrystalline materials // Physical Mesomechanics. – 2019. – Vol.22, No.5. – Pp.402–419.*)
141. Трусов П.В., Швейкин А.И. Многоуровневые физические модели моно- и поликристаллов. Статистические модели // Физическая мезомеханика. – 2011. – Т. 14, №4. – С. 17–28. (*переводная – Trusov P.V., Shveykin A.I. Multilevel crystal plasticity models of single- and polycrystals. Statistical models// Physical Mesomechanics. – 2013. – Vol.16, No.1. – Pp. 23–33.*)
142. Трусов П.В., Швейкин А.И. Многоуровневые физические модели моно- и поликристаллов. Прямые модели // Физическая мезомеханика. – 2011. – Т. 14, №5. – С. 5–30. (*переводная – Trusov P.V., Shveykin A.I. Multilevel crystal plasticity models of single- and polycrystals. Direct models// Physical Mesomechanics. – 2013. – Vol.16, No.2. – Pp. 99–124.*)
143. Трусов П.В., Швейкин А.И. О разложении движения и определяющих соотношениях в геометрически нелинейной упруговязкопластичности кристаллитов // Физическая мезомеханика. – 2016. – Т.19. №3. – С. 25–38. (*переводная – Trusov P.V., Shveykin A.I. On motion decomposition and*

constitutive relations in geometrically nonlinear elastoviscoplasticity of crystallites // Physical Mesomechanics. – 2017. – Vol. 20, Is. 4. – Pp 377–391.)

144. Трусов П.В., Швейкин А.И. Теория пластичности. – Пермь: Изд-во Перм. национ. исслед. политехн. ун-та, 2011. – 419 с.
145. Трусов П.В., Швейкин А.И., Нечаева Е.С., Волегов П.С. Многоуровневые модели неупругого деформирования материалов и их применение для описания эволюции внутренней структуры // Физическая мезомеханика. – 2012. – Т. 15, №1. – С. 33–56. (*переводная – Trusov P.V., Shveykin A.I., Nechaeva E.S., Volegov P.S. Multilevel models of inelastic deformation of materials and their application for description of internal structure evolution// Physical Mesomechanics. – 2012. – Vol. 15, Iss. 3-4. – Pp. 155–175.)*
146. Трусов П.В., Швейкин А.И., Янц А.Ю. О разложении движения, независимых от выбора системы отсчета производных и определяющих соотношениях при больших градиентах перемещений: взгляд с позиций многоуровневого моделирования// Физическая мезомеханика. – 2016. – Т.19. №2. – С. 47–65. (*переводная – Trusov P.V., Shveykin A.I., Yanz A.Yu. Motion decomposition, frame-indifferent derivatives, and constitutive relations at large displacement gradients from the viewpoint of multilevel modeling// Physical Mesomechanics. – 2017. – Vol. 20, Iss. 4. – Pp. 357–376.)*
147. Трусов П.В., Янц А.Ю. О физическом смысле неголомной меры деформации // Физическая мезомеханика. – 2015. – Т.18, №2. – С.13–21.
148. Трусов П.В., Янц А.Ю., Теплякова Л.А. Прямая физическая упруговязкопластическая модель: приложение к исследованию деформирования монокристаллов// Физическая мезомеханика. – 2018. – Т.21, №2. – С.33–44.
149. Тулупова О.П. и др. Новая методика идентификации определяющих соотношений по результатам технологических экспериментов / Тулупова О.П., Ганиева В.Р., Круглов А.А., Еникеев Ф.У. // Письма о материалах. – 2017. – Т. 7, № 1 (25). – С. 68–71.

150. Фридляндер И.Н. Современные алюминиевые, магниевые сплавы и композиционные материалы на их основе // *Металловедение и термическая обработка металлов.* – 2002. – №7. – С. 24–29.
151. Хворова Л.А. Методы исследования чувствительности моделей продуктивности агроэкосистем // *Изв. АлтГУ.* – 2013. – № 1-1 (77). – С. 128–132.
152. Химмельблау Д. Прикладное нелинейное программирование. – М.: Мир, 1975. – 536 с.
153. Хог Э., Чой К., Комков В. Анализ чувствительности при проектировании конструкций. – М.: Мир, 1988. – 428 с.
154. Хоникомб Р. Пластическая деформация металлов.– М.: Мир, 1972. – 408 с.
155. Чувильдеев В.Н. и др. Анализ изменения диффузионных свойств неравновесных границ зерен при рекристаллизации и сверхпластической деформации субмикроструктурных металлов и сплавов / Чувильдеев В.Н., Нохрин А.В., Пирожникова О.Э., Грязнов М.Ю., Лопатин Ю.Г., Мышляев М.М., Копылов В.И. // *Физика твердого тела.* – 2017. – Т.59, №8. – С.1561–1569.
156. Чувильдеев В.Н. и др. Деформационное упрочнение в условиях структурной сверхпластичности / Чувильдеев В.Н., Пирожникова О.Э., Нохрин А.В., Мышляев М.М. // *Физика твердого тела.* – 2007. – Т.49, №4. – С.650–656.
157. Чувильдеев В.Н. Неравновесные границы зерен в металлах. Теория и приложения. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004. – 304 с.
158. Чувильдеев В.Н. Теория неравновесных границ зерен в металлах и её приложения для описания нано и микроструктурных материалов // *Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского* № 5(2). – 2010. – С.124–131.
159. Шарифуллина Э.Р. Многоуровневая модель для описания сверхпластического деформирования поликристаллических материалов // *Дисс. ...канд. физ.-мат. н., Пермь, 2019.* – 149 с.
160. Шарифуллина Э.Р., Трусков П.В., Швейкин А.И. Программа для ЭВМ «Реализация трехуровневой модели неупругого деформирования

поликристаллов с описанием зернограничного скольжения (Трехуровневая модель поликристалла)» // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2015663151 от 11.12.2015 г.

161. Шарифуллина Э.Р., Швейкин А.И., Трусков П.В. Обзор экспериментальных исследований структурной сверхпластичности: эволюция микроструктуры материалов и механизмы деформирования // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2018. – №3. – С. 103–127.
162. Шарифуллина Э.Р., Швейкин А.И., Трусков П.В. Программа для ЭВМ «Реализация трехуровневой математической модели упруговязкопластического и сверхпластического деформирования поликристаллических металлов»// Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2019615524 от 26.04.2019 г.
163. Швайко Н.Ю. К теории пластичности, основанной на концепции скольжения // Прикл. механика. – 1976. – Т. 12, № 11. – С. 12–24.
164. Швейкин А.И. Многоуровневые модели поликристаллических металлов: сопоставление определяющих соотношений для кристаллитов// Проблемы прочности и пластичности. – 2017. – Т.79, №4. – С.385–397.
165. Швейкин А.И. Модель упругопластического деформирования ГЦК-поликристаллов: теория и приложения к описанию формирования текстуры // Дисс. ...канд. физ.-мат. н., Пермь, 2019. – 139 с.
166. Швейкин А.И., Ашихмин В.Н., Трусков П.В. О моделях ротации решетки при деформировании металлов // Вестник ПГТУ. Механика. – 2010. – №1. – С. 111–127.
167. Швейкин А.И., Бразгина О.В., Кондратьев Н.С. Моделирование эволюции структуры ГЦК-, ОЦК- и ГПУ-поликристаллов при неупругом деформировании// Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского. – 2011. – №4, Ч.4. – С. 1859–1861.
168. Швейкин А.И., Трусков П.В. Решение краевых задач с применением многоуровневых конститутивных моделей поликристаллических металлов//

Вестник Тамбовского университета. Серия: Естественные и технические науки. – 2013. – Т. 18, Вып.4. – С. 1905–1906.

169. Швейкин А.И., Трусов П.В. Сопоставление сформулированных в терминах актуальной и разгруженной конфигураций геометрически нелинейных упруговязкопластических определяющих соотношений для кристаллитов // Физическая мезомеханика. – 2016. – Т.19. №5. – С. 48–57. (*переводная – Shveikin A.I., Trusov P.V. Correlation between geometrically nonlinear elastoviscoplastic constitutive relations formulated in terms of the actual and unloaded configurations for crystallites // Physical Mesomechanics. – 2018. – Vol.21, No.3. – Pp. 193–202.*)
170. Швейкин А.И., Шарифуллина Э.Р. Анализ конститутивных соотношений для описания внутризеренного дислокационного скольжения в рамках двухуровневой упруговязкопластической модели ГЦК-поликристаллов // Вестник Тамбовского государственного университета. – 2013. – Т.18, Вып.4. – С. 1665–1666.
171. Швейкин А.И., Шарифуллина Э.Р., Трусов П.В., Пушков Д.А. Об оценке чувствительности статистических многоуровневых моделей поликристаллических металлов к возмущениям параметров // Вычислительная механика сплошных сред. – 2018. – Т. 11, № 2. – С. 214-231.
172. Шермергор Т.Д. Теория упругости микронеоднородных сред. – М.: Наука, 1977. – 400 с.
173. Шоршоров М.Х. и др. Сверхпластичность металлических материалов / Шоршоров М.Х., Тихонов А.С., Булат С.И., Гуров К.П., Надирашвили Н.И., Антипов В.И. – М.: Наука, 1973. – 220 с.
174. Шоршоров М.Х., Базык А.С., Казаков М.В. Сверхпластичность сталей и сплавов и ресурсосберегающие технологии процессов обработки металлов давлением. – Тула: Изд. ТГУ, 2018. – 158 с.
175. Ahzi S., M'Guil S. A new intermediate model for polycrystalline viscoplastic deformation and texture evolution // Acta Materialia. – 2008. – Vol.56. – P.5359–5369.

176. Aifantis E.C. Gradient material mechanics: perspectives and prospects // *Acta Mech.* – 2014. – Vol.225. – P.999–1012.
177. Aifantis E.C. On the role of gradients in the localization of deformation and fracture // *Int. J. Eng. Sci.* – 1992. – Vol.30. – P.1279–1299.
178. Alleman C. e.a. Distribution-enhanced homogenization framework and model for heterogeneous elasto-plastic problems / Alleman C., Luscher D.J., Bronkhorst C., Ghosh S. // *J. Mech. Phys. Solids.* – 2015. – Vol.85. – P.176–202.
179. Altenbach H., Eremeyev V.A. (Editors). Generalized continua from the theory to engineering applications / Int. Centre for Mechanical Sciences. Courses and Lectures. Vol.541, 2013. – 388 p.
180. Altenbach H., Eremeyev V.A. Strain rate tensors and constitutive equations of inelastic micropolar materials // *Int. J. Plasticity.* – 2014. – Vol.63. – P.3–17.
181. Altenbach J., Altenbach H., Eremeyev V.A. On generalized Cosserat-type theories of plates and shells: a short review and bibliography // *Arch. Appl. Mech.* –2010. – Vol.80. – P.73–92.
182. Anand K.K., Van Houtte P., Delannay L. Assessment of plastic heterogeneity in grain interaction models using crystal plasticity finite element method // *Int. J. Plasticity.*– 2010. – Vol.26. – P.1220–1233.
183. Anand L. Single-crystal elasto-viscoplasticity: application to texture evolution in polycrystalline metals at large strains // *Computer methods in applied mechanics and engineering.* – 2004. –Vol.193. – P.5359–5383.
184. Anand L., Kothari M. A computational procedure for rate-independent crystal plasticity // *J. Mech. Phys. Solids.* –1996. – Vol.44, No.4.– P.525–558.
185. Aravas N. Finite elastoplastic transformations of transversely isotropic metals // *Int. J. Solids Structures.* – 1992. – Vol.29, No.17. – P.2137–2157.
186. Aravas N. Finite-strain anisotropic plasticity and the plastic spin // *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* – 1994. – Vol.2. – P.483–504.
187. Ardeljan M., Beyerlein I.J., Knezevic M. A dislocation density based crystal plasticity finite element model: Application to a two-phase polycrystalline HCP/BCC composites // *J. Mech. and Phys. Solids.* – 2014. – Vol.66. – P.16–31.

188. Arghavani J., Auricchio F., Naghdabadi R. A finite strain kinematic hardening constitutive model based on Hencky strain: General framework, solution algorithm and application to shape memory alloys // *Int. J. Plasticity*. – 2011. – Vol.27. – P.940–961.
189. Aris S., Pyzalla A., Reimers W. Simulation of the development of deformation textures and residual stresses using the Taylor–Bishop–Hill theory // *Comput. Mater. Sci.*–1999. – Vol.16. – P.76–80.
190. Arminjon M. A regular form of the Schmid law. Application to the ambiguity problem // *Textures and Microstructures*. – 1991. – Vols 14–18. – P.121–128.
191. Asaro R.J. Micromechanics of crystals and polycrystals // *Advances in Applied Mechanics*. – 1983. – Vol.23. – P.1–115.
192. Asaro R.J., Needleman A. Texture development and strain hardening in rate dependent polycrystals // *Acta Metall.* – 1985. – Vol.33. – No.6 – P.923–953.
193. Ashby M.F. The deformation of plastically non-homogeneous materials // *Phil. Mag.: A Journal of Theoretical Experimental and Applied Physics* – 1970. – Vol.21. – P.399–424.
194. Askari H. e.a. A stochastic crystal plasticity framework for deformation of micro-scale polycrystalline materials / Askari H., Maughan M.R., Abdolrahim N., Sagapuram D., Bahr D.F., Zbib H.M. // *Int. J. Plasticity*. – 2015. – Vol.68. – P.21–33.
195. Askari H. e.a. A study of the hot and cold deformation of twin-roll cast magnesium alloy AZ31 / Askari H., Young J., Field D., Kridli G., Li D., Zbib H. // *Philosophical Magazine*. – 2014. – Vol. 94, No.4. – P.381–403.
196. Askari H. e.a. Prediction of flow stress and textures of AZ31 magnesium alloy at elevated temperature / Askari H., Young J.P., Field D.P., Kridli G., Zbib H.M. // *Philosophical Magazine*. – 2014. – Vol.94, No.29. – P.3353–3367.
197. Baczański A. e.a. Plastic incompatibility stresses and stored elastic energy in plastically deformed copper / Baczański A., Hfaiedh N., François M., Wierzbowski K. // *Mater. Sci. Eng.* – 2009. – A 501. – P.153–165.

198. Balasubramanian S., Anand L. Elasto-viscoplastic constitutive equations for polycrystalline fcc materials at low homologous temperatures // *J. Mech. and Phys. Solids.* – 2002. – Vol.50. – P.101–126.
199. Bell J.F. A retrospect on the contributions of G.I. Taylor to the continuum physics of solids // *Experimental Mechanics.* – 1995. – Vol.35, Is.1. – P.1–10.
200. Bengough G.D. A study of the properties of alloys at high temperatures // *J. Inst. Metals.* – 1912. – Vol.7. – P.123–174.
201. Berbon P.B. e.a. Fabrication of bulk ultrafine-grained materials through intense plastic straining / Berbon P.B., Tsenev N.K., Valiev R.Z., Furukawa M., Horita Z., Nemoto M., Langdon T.G. // *Metallurgical and materials transactions A.* – 1998. – Vol.29A. – P.2237–2243.
202. Bernstein B. Hypo-elasticity and elasticity // *Arch. Rat. Mech. Anal.* – 1980. – Vol.6. – P.89–104.
203. Bertram A. An alternative approach to finite plasticity based on material isomorphisms// *International Journal of Plasticity.* – 1998. – Vol.52. – P.353–374.
204. Bertram A. Finite gradient elasticity and plasticity: a constitutive thermodynamical framework // *Continuum Mech. Thermodyn.* – 2016. – Vol.28, Is.3. – P.869–883.
205. Bertram A., Böhlke T., Kraska M. Texture development of aluminum polycrystals under finite plastic deformations // *IUTAM Symposium on Micro- and Macrostructural Aspects of Thermoplasticity / O. T. Bruhns and E. Stein (eds.).* – 2002. – P.127–136.
206. Bertram A., Forest S. The thermodynamics of gradient elastoplasticity // *Continuum Mech. Thermodyn.* – 2014. – Vol. 26. – P.269–286.
207. Bettaieb M.B. e.a. On the numerical integration of rate independent single crystal behavior at large strain / Bettaieb M.B., Débordes O., Dogui A., Duchkne L., Keller C. // *Int. J. Plasticity.* – 2012. – Vol.32–33. – P.184–217.
208. Beyerlein I.J. e.a. Texture evolution via combined slip and deformation twinning in rolled silver–copper cast eutectic nanocomposite / Beyerlein I.J., Mara N.A., Bhattacharyya D., Alexander D.J., Necker C.T. // *Int. J. Plasticity.* – 2011. – Vol.27. – P. 121–146.

209. Beyerlein I.J., Tome C.N. A dislocation-based constitutive law for pure Zr including temperature effects // *Int. J. Plasticity*. – 2008. – Vol.24. – P.867–895.
210. Bhattacharya K. Wedge-like microstructure in martensites // *Acta metall mater.* – 1991. – Vol. 39, No. 10. – Pp. 2431-2444.
211. Bishop J.F., Hill R. A theory of the plastic distortion of a polycrystalline aggregate under combined stresses // *Phil. Mag. Ser.7.* – 1951. – Vol.42, No.327. – P.414–427.
212. Bishop J.F.W., Hill R. A theoretical derivation of the plastic proper-ties of a polycrystalline face – centered metal // *Phil. Mag. Ser.7.* – 1951. – Vol.42. – No.334. – P.1298–1307.
213. Blanco P.J. e.a. The method of multiscale virtual power for the derivation of a second order mechanical model / Blanco P.J., Sánchez P.J., de Souza Neto E.A., Feijóo R.A. // *Mechanics of Materials*. – 2016. – Vol.99. – P.53–67.
214. Blanco P.J. e.a. Variational foundations and generalized unified theory of RVE-based multiscale models / Blanco P.J., Sánchez P.J., de Souza Neto E.A., Feijóo R.A. // *Arch. Computat. Methods Eng.* – 2016. – Vol.23. – P.191–253.
215. Brepols T., Vladimirov I.N., Reese S. Numerical comparison of isotropic hypo- and hyperelastic-based plasticity models with application to industrial forming processes // *Int. J. Plasticity*. – 2014. – Vol.63. – P.18–48.
216. Bricknell R.H., Edington J.W. Textures in a superplastic Al-6Cu-0.3Zr alloy // *Acta Metallurgica*. – 1979. – Vol.27. – P. 1303–1311.
217. Bronkhorst C.A., Kalidindi S.R., Anand L. Polycrystalline Plasticity and the Evolution of Crystallographic Texture in FCC Metals // *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A.* – 1992. – Vol.341. – P.443–477.
218. Bruhns O. T., Xiao H., Meyers A. New results for the spin of the Eulerian triad and the logarithmic spin and rate // *Acta Mechanica*. – 2002. – Vol.155. – P.95–109.
219. Bruhns O.T. The Prandtl–Reuss equations revisited // *Z. Angew. Math. Mech.* – 2014. – Vol.94, No.3. – P.187–202.
220. Bruhns O.T., Xiao H., Meyers A. Self-consistent Eulerian rate type elasto-plasticity models based upon the logarithmic stress rate // *Int. J. Plasticity*. – 1999. – Vol.15. – P.479–520.

221. Bruhns O.T., Xiao H., Meyers A. Some basic issues in traditional Eulerian formulations of finite elastoplasticity // *Int. J. Plasticity*. – 2003. – Vol.19. – P.2007–2026.
222. Cáceres C.H., Wilkinson D.S. Large strain behaviour of a superplastic copper alloy – I. Deformation // *Acta metal.* – 1984. – Vol. 32, No. 3. – P. 415–422.
223. Casey J. On elastic-thermo-plastic materials at finite deformations // *Int. J. Plasticity*. – 1998. – Vol.14. – Nos.1-3. – P.173–191.
224. Cereceda D. e.a. Linking atomistic, kinetic Monte Carlo and crystal plasticity simulations of single-crystal tungsten strength / Cereceda D., Diehl M., Roters F., Shanthraj P., Raabe D., Perlado J.M., Marian J. // *GAMM-Mitt.* – 2015. – Vol.38, No. 2. – P.213–227.
225. Cereceda D. e.a. Unraveling the temperature dependence of the yield strength in single-crystal tungsten using atomistically-informed crystal plasticity calculations / Cereceda D., Diehl M., Roters F., Raabe D., Perlado J.M., Marian J. // *Int. J. Plasticity*. – 2016. – Vol.78. – P.242–265.
226. Cermelli P., Gurtin M.E. On the characterization of geometrically necessary dislocations in finite plasticity // *J. Mech. Phys. Solids*. – 2001. – Vol.49 – P.1539–1568.
227. Chaboche J.L. A review of some plasticity and viscoplasticity constitutive theories // *Int. J. Plasticity*. – 2008. – Vol. 24. – P. 1642–1693.
228. Cleja-Țigoiu S., Iancu L. Orientational anisotropy and plastic spin in finite elastoplasticity // *Int. J. Solids and Structures*. – 2011. – Vol.48. – P.939–952.
229. Cosserat E., Cosserat F. *Theorie des corps deformables*. – Paris: A.Hermann et fils, 1909. – 226 p.
230. Cyr E.D. e.a. A new crystal plasticity framework to simulate the large strain behaviour of aluminum alloys at warm temperatures / Cyr E.D., Brahme A., Mohammadi M., Mishra R.K., Inal K. // *Materials Sci. Enging A*. – 2018. – Vol.727. – P.11–28.
231. Dafalias Y.F. On multiple spins and texture development. Case study: kinematic and orthotropic hardening // *Acta Mechanica*. – 1993. – Vol.100. – P.171–194.

232. Dafalias Y.F. Plastic spin: necessity or redundancy? // *Int. J. Plasticity*. – 1998. – Vol.14, No.9. – P.909–931.
233. Dao M., Asaro R.J. Localized deformation modes and non-Schmid effects in crystalline solids. P.I. Critical conditions of localization // *Mech. Mater.* – 1996a. – Vol.23. – P.71–102.
234. De Borst R. A generalization of J2-flow theory for polar continua // *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. – 1993. – Vol.103. – P.347–362.
235. De Souza Neto E.A. e.a. An RVE-based multiscale theory of solids with micro-scale inertia and body force effects / De Souza Neto E.A., Blanco P.J., Sánchez P.J., Feijóo R.A. // *Mechanics of Materials*. – 2015. – Vol.80. – P.136–144.
236. Demir E. A Taylor-based plasticity model for orthogonal machining of single-crystal FCC materials including frictional effects // *Int. J. Adv. Manuf. Technol.* – 2009. – Vol.40. – P.847–856.
237. Dienes J.K. On the analysis of rotation and stress rate in deforming bodies // *Acta Mech.* – 1979. – Vol.32. – P.217–232.
238. Dobatkin S.V. e.a. Grain refinement and superplastic flow in an aluminum alloy processed by high-pressure torsion / S.V. Dobatkin [et al.] // *Materials Science and Engineering A*. – 2005. – 408. – pp. 141-146. Doi: 10.1016/j.msea.2005.07.023
239. Dumoulin S. e.a. Numerical modelling of plastic forming of aluminium single crystals / Dumoulin S., Hopperstad O.S., Sène N.A., Balland P., Arrieux R., Moreau J.-M. // *Int. J. Mater. Form.* – 2013. – No.6. – P.13–27.
240. Edington J.W., Melton K.N., Culter C.P. Superplasticity // *Progress in Materials Science*. – 1976. – Vol. 21, No. 2. – Pp.61-158.
241. Enikeev F.U., Kruglov A. A. An analysis of the superplastic forming of a thin circular diaphragm // *International Journal of Mechanical Sciences*. – 1995. – Vol.37, No.5. – Pp.473 – 483.
242. Eremeyev V.A., Lebedev L.P., Altenbach H. *Foundations of Micropolar Mechanics*. – Heidelberg, New York, Dordrecht, London: Springer, 2013. – 145 p.
243. Eshraghi M.A. *Finite strain elastoplasticity: Consistent Eulerian and Lagrangian approaches* // PhD thesis. – Waterloo, Ontario, Canada, 2009. – 246 p.

244. Estrin Y. e.a. A dislocation-based model for all hardening stages in large strain deformation / Estrin Y., Tóth L.S., Molinari A., Bréchet Y. // *Acta mater.* – 1998. – Vol.46, No.15. – P.5509–5522.
245. Evers L.P., Parks D.M., Brekelmans W.A.M., Geers M.G.D. Crystal plasticity model with enhanced hardening by geometrically necessary dislocation accumulation // *J. Mech. and Phys. Solids.* – 2002. – Vol.50. – P.2403–2424.
246. Figueiredo R.B., Langdon T.G. Achieving superplastic properties in a ZK10 magnesium alloy processed by equal-channel angular pressing // *Journal of Materials Research and Technology*– 2017. – Vol.6 (2). – P.129–135.
247. Follansbee P.S., Kocks U.F. A constitutive description of copper based on the use of the mechanical threshold stress as an Internal State Variable // *Acta Metall.* – 1988. – Vol.36. – P.81–93.
248. Forest S, Sievert R. Elastoviscoplastic constitutive frameworks for generalized continua // *Acta Mechanica.* – 2003. – Vol.160. – P.71–111.
249. Forest S, Sievert R. Nonlinear microstrain theories // *Int. J. Solids Struct.* – 2006. – Vol.43. – P.7224–7245.
250. Forest S. Modeling slip, kink and shear banding in classical and generalized single crystal plasticity // *Acta mater.* – 1998. – Vol.46, No.9. – P.3265–3281.
251. Forest S., Barbe F., Cailletaud G. Cosserat modelling of size effects in the mechanical behaviour of polycrystals and multi-phase materials // *Int. J. Solids Struct.* – 2000. – Vol.37. – P.7105–7126.
252. Forest S., Rubin M.B. A rate-independent crystal plasticity model with a smooth elastic-plastic transition and no slip indeterminacy // *European Journal of Mechanics A/Solids.* – 2016. – Vol.55. – P.278–288.
253. Franz G., Abed-Meraim F., Berveiller M. Strain localization analysis for single crystals and polycrystals: Towards microstructure-ductility linkage // *Int. J. Plasticity.* – 2013. – Vol.48. – P.1–33.
254. Furukawa M. e.a. Influence of magnesium on grain refinement and ductility in a dilute Al-Sc alloy / Furukawa M., Utsunomiya A., Matsubara K., Horita Z., Langdon T.G. // *Acta mater.* – 2001. – Vol.49. – P.3829–3838.

255. Gambin W. A model of rigid – ideally plastic crystal // *J. Tech. Phys.* – 1987. – Vol.28, No.3. – P.309–326.
256. Gambin W. Plasticity of crystals with interacting slip systems // *Eng. Trans.* –1991. – Vol.39. – P.303–324.
257. Gambin W. Refined analysis of elastic–plastic crystals // *Int. J. Solids Struct.* – 1992. – Vol.29. – P.2013–2021.
258. Gambin W., Barlat F. Modeling of deformation texture development based on rate independent crystal plasticity // *Int. J. Plasticity.* – 1997. – Vol.13, No.1/2. – P.75–85.
259. Geers M.G.D. e.a. Coupled glide-climb diffusion-enhanced crystal plasticity / Geers M.G.D., Cottura M., Appolaire B., Busso E.P., Forest S., Villani A. // *J. Mechanics and Physics of Solids.* – 2014. – Vol.70. – P.136–153.
260. Gérard C., Cailletaud G., Bacroix B. Modeling of latent hardening produced by complex loading paths in FCC alloys. – *Int. J. Plasticity.* – 2013. – Vol.42. – P.194–212.
261. Gerken J.M., Dawson P.R. A crystal plasticity model that incorporates stresses and strains due to slip gradients // *J. Mechanics and Physics of Solids.* – 2008. – Vol.56. – P.1651–1672.
262. Germain P., Nguyen Q., Suquet P. Continuum thermodynamics // *J. Appl. Mech.* – 1983. – Vol.50. – P.1010–1020.
263. Ghoniem N.M. e.a. Multiscale modelling of nanomechanics and micromechanics: an overview / Ghoniem N.M., Busso E.P., Kioussis N., Huang H. // *Phil. Mag.* – 2003. – Vol.83, No.31–34. – P.3475–3528.
264. Grammenoudis P., Tsakmakis C. Micropolar plasticity theories and their classical limits. Part I: Resulting model // *Acta mechanica.* – 2007. – Vol.189. – P.151–175.
265. Green A.E., Naghdi P.M. A general theory of an elastic-plastic continuum // *Arch. Rational Mech. Anal.* – 1965. – Vol.18. – P.251–281. DOI: 10.1007/BF00251666
266. Groh S. e.a. Multiscale modeling of the plasticity in an aluminum single crystal / Groh S., Marin E.B., Horstemeyer M.F., Zbib H.M. // *Int. J. Plasticity.* – 2009. – Vol.25. – P.1456–1473.

267. Guo Y.B., Wen Q., Horstemeyer M.F. An internal state variable plasticity-based approach to determine dynamic loading history effects on material property in manufacturing processes // *Int. J. Mech. Sci.* – 2005. – Vol.47. – P.1423–1441.
268. Gurtin M.E., Anand L., Lele S.P. Gradient single-crystal plasticity with free energy dependent on dislocation densities // *J. Mech. Phys. Solids* – 2007. – Vol.55(9). – P.1853–1878.
269. Gurtin M.E., Fried E., Anand L. *The mechanics and thermodynamics of continua.* – Cambridge University Press, 2010. – 694 p.
270. Gurtin M.E., Needleman A. Boundary conditions in small-deformation, single-crystal plasticity that account for the Burgers vector // *J. Mech. Phys. Solids.* – 2005. – Vol.53. – P.1–31.
271. Gutiérrez M.A., de Borst R. Simulation of size-effect behaviour through sensitivity analyses // *Eng. Fract. Mech.* – 2003. – Vol. 70, no. 16. – P. 2269-2279.
272. Gutkin M.Yu., Ovid'ko I.A., Skiba N.V. Crossover from grain boundary sliding to rotational deformation in nanocrystalline materials // *Acta Materialia.* – 2003. – Vol. 51. – Pp.4059–4071.
273. Habraken A.M. Modelling the plastic anisotropy of metals // *Arch. Comput. Meth. Engng.* – 2004. – Vol.11, No.1. – P.3–96.
274. Halphen B., Nguyen Q. Sur les matériaux standard généralisés // *J. Mécanique.* – 1975. – Vol.14. – P.39–63.
275. Hane K.F., Shield T.W. Symmetry and microstructure in martensites // *Philosophical Magazine A.* – 1998. – Vol.78, No.6. – P. 1215-1252.
276. Harder J. FEM-simulation of the hardening behavior of FCC single crystals // *Acta Mechanica.* – 2001. – Vol.150 – P.197–217.
277. Havner K.S. Analysis of fcc crystals in two singular orientations in (1 1 0) channel die compression // *Mech.of Mater.* – 2010. – Vol.42. – P.657–672.
278. Havner K.S. Comparative evaluation of a viscoplastic power-law and rate-independent crystal plasticity in channel die compression// *Mechanics of Materials.* – 2013. – Vol.59. – P.126–141.

279. Horstemeyer M.F. Multiscale modeling: A review // In «Practical Aspects of Computational Chemistry». J. Leszczynski and M.K. Shukla (eds.). – Springer Science + Business Media B.V., 2009. – P.87–135.
280. Horstemeyer M.F., Bammann D.J. Historical review of internal state variable theory for inelasticity // *Int. J. Plasticity*. – 2010. – Vol.26. – P.1310–1334.
281. Horstemeyer M.F., Potirniche G.P., Marin E.B. Crystal plasticity // In *Handbook of Materials Modeling*. S. Yip (ed.) – Springer: Netherlands, 2005. – P.1133–1149.
282. Hu L., Rollet A.D., Iadicola M., Foecke T., Banovic S. Constitutive relations for AA 5754 based on crystal plasticity // *Metal. Materials Trans. A*. – 2012. – Vol.43A. – P.854–869.
283. Huang Y., Langdon T.G. Characterization of deformation processes in a Zn-22% Al alloy using atomic force microscopy // *Journal of Materials Science*. – 2002. – Vol.37. – P.4993–4998.
284. Hutchinson J.W. Bounds and self-consistent estimates for creep of polycrystalline materials // *Proc. R. Soc. Lond. A*. – 1976. – Vol.348A. – P.101–127.
285. Hutchinson J.W. Creep and plasticity of hexagonal polycrystals as related to single crystal slip // *Metallurgical Transactions A*. – 1977. – Vol.8A. – P.1465–1469.
286. Ibrahimbegovic A. *Nonlinear Solid Mechanics: Theoretical Formulations and Finite Element Solution Methods*. – Berlin: Springer. – 2009. – 574 p.
287. Inal K., Mishra R.K. Crystal plasticity based numerical modelling of large strain deformation in hexagonal closed packed metals // *Procedia IUTAM*. – 2012. – Vol.3. – P.239–273.
288. Jamond O., Gatti R., Roos A., Devincere B. Consistent formulation for the Discrete-Continuous Model: Improving complex dislocation dynamics simulations // *Int. J. Plasticity*. – 2016. – Vol.80. – P.19–37.
289. Jaumann G. Geschlossenes System physikalischer und chemischer Differentialgesetze // *Sitzber. Akad. Wiss. Wien, Abt. IIa*. – 1911. – B.120. – S.385–530.
290. Jiao Y., Fish J. Is an additive decomposition of a rate of deformation and objective stress rates passé? // *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg*. – 2017. – Vol. 327. – P. 196–225.

291. Jiao Y., Fish J. On the equivalence between the multiplicative hyper-elasto-plasticity and the additive hypo-elasto-plasticity based on the modified kinetic logarithmic stress rate// *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* – 2018. – Vol. 340. – P. 824–863.
292. Jung K.-H. e.a. Prediction of the effects of hardening and texture heterogeneities by finite element analysis based on the Taylor model / Jung K.-H., Kim D.-K., Im Y.-T., Lee Y.-S. // *Int. J. Plasticity.* – 2013. – Vol.42. – P.120–140.
293. Kaibyshev R., Musin F., Gromov D., Nieh T. G., Lesuer D.R. Effect of Cu and Zr additions on the superplastic behavior of 6061 aluminium alloy // *Materials Transactions.* – 2002. –Vol.43, No.10. – P.2392-2399.
294. Kalidindi S.R. Incorporation of deformation twinning in crystal plasticity models // *J. Mech. Phys. Solids.* – 1998. –Vol.46, No.2. – P.267–290.
295. Kalidindi S.R. Modeling anisotropic strain hardening and deformation textures in low stacking fault energy fcc metals // *Int. J. Plasticity.* – 2001. – Vol.17. – P.837–860.
296. Kalidindi S.R., Bronkhorst C.A., Anand L. Crystallographic texture evolution in bulk deformation processing of FCC metals // *J. Mech. Phys. Solids.* – 1992. – Vol.40, No.3. – P.537–569.
297. Khadyko M., Dumoulin S., Cailletaud G., Hopperstad O.S. Latent hardening and plastic anisotropy evolution in AA6060 aluminium alloy // *Int. J. Plasticity.* – 2016. – Vol.76. – P.51–74.
298. Khaledi K, Mahmoudi E, Datcheva M, König D, Schanz T. Sensitivity analysis and parameter identification of a time dependent constitutive model for rock salt // *J. Comput. Appl. Math.* – 2016. – Vol. 293. – P. 128–138.
299. Kim H.-K., Oh S.-I. Finite element analysis of grain-by-grain deformation by crystal plasticity with couple stress // *Int. J. Plasticity.* – 2003. – Vol.19. – P.1245–1270.
300. Kleiber M., Hien T.D., Postek E. Incremental finite element sensitivity analysis for non-linear mechanics applications // *Int. J. Numer. Meth. Eng.* –1994. – Vol. 37, no. 19. – P. 3291-3308.

301. Knezevic M. e.a. Three dimensional predictions of grain scale plasticity and grain boundaries using crystal plasticity finite element models / Knezevic M., Drach B., Ardeljan M., Beyerlein I.J. // *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* – 2014. – Vol.277. – P.239–259.
302. Ko Y.G., Lee C.S., Shin D.H., Semiatin S.L. Low-temperature superplasticity of ultra-fine-grained Ti-6Al-4V processed by equal-channel angular pressing // *Metallurgical and materials transactions A.* – 2006. – Vol.37A. – P.381-391.
303. Kocks U.F. The relation between polycrystal deformation and single crystal deformation // *Metal. Trans.* –1970. –Vol.1, No.5. – P.1121–1143.
304. Kocks U.F., Canova G.R., Jonas J.J. Yield vectors in F.C.C. crystals // *Acta metall.* – 1983. – Vol.31, No.8. – P.1243–1252.
305. Kocks U.F., Mecking H. Physics and phenomenology of strain hardening: the FCC case // *Progress in Materials Science.* – 2003. – Vol.48. – P.171–273.
306. Kojić M., Bathe K.J. Studies of finite element procedures – stress solution of a closed elastic strain path with stretching and shearing using the updated Lagrangian Jaumann formulation // *Comput. Struct.* – 1987. – Vol.26 (1–2). – P.175–179.
307. Kok S., Beaudoin A.J., Tortorelli D.A. A polycrystal plasticity model based on the mechanical threshold // *Int. J. Plasticity.* – 2002a. – Vol.18. – P.715–741.
308. Kothari M., Anand L. Elasto–viscoplastic constitutive equations for polycrystalline metals: application to tantalum // *J. Mech. Phys. Solids.* – 1998. – Vol.46, No.I. – P.51 –83.
309. Kowalczyk-Gajewska K. Modelling of texture evolution in metals accounting for lattice reorientation due to twinning // *Eur. J. Mechanics A/Solids.* – 2010. – Vol.29. – P.28–41.
310. Kratochvil J. A theory of non-proportional cyclic plasticity based on micromechanical approach // *Proc. IMMM-93. Int. Sem. on Microstruct. and Mech. Properties of New Engineering Mater.* – Mie Academic Press, 1993. – P. 89–94.
311. Kratochvil J., Tokuda M. Plastic response of polycrystalline metals subjected to complex deformation history // *Trans. ASME. J. Engng. Mater. Technol.* – 1984. – Vol.106. – P.299–303.

312. Krivilyov M. e.a. Multiscale analysis of the effect of competitive nucleation on phase selection in rapid solidification of rare–earth ternary magnetic materials / M. Krivilyov, T. Volkman, J. Gao, J. Fransaer // *Acta Materialia*. – 2012. – Vol.60. – Pp. 112–122.
313. Kroner E. Allgemeine kontinuumstheorie der versetzungen und eigenspannungen // *Arch. Rational Mech. Anal.* – 1960. – B.4 (1) – S.273–334.
314. Kubin L.P., Mortensen A. Geometrically necessary dislocations and strain-gradient plasticity: a few critical issues // *Scripta Materialia*. – 2003. – Vol.48. – P. 119–125.
315. Kuhlmann-Wilsdorf D. Theory of workhardening 1934-1984 // *Metallurgical Transactions A*. – 1985. – Vol.16. – P.2091–2108.
316. Kuhlman-Wilsdorf D. e.a. Deformation bands, the LEDS theory, and their importance in texture development: Part I. Previous evidence and new observations / Kuhlman-Wilsdorf D., Kulkarni S.S., Moore J.T., Starke E.A., Jr. // *Metallurgical and Mater. Trans. A*. – 1999. –Vol.30A.– P.2491–2501.
317. Kumar A.V., Yang C. Study of work hardening models for single crystals using three dimensional finite element analysis // *Int. J. Plasticity*. – 1999. – Vol.15. – P.737–754.
318. Kuroda M. On large-strain finite element solutions of higher-order gradient crystal plasticity // *Int. J. Solids and Structures*. – 2011. – Vol.48. – P.3382–3394.
319. Kuroda M., Tvergaard V. A finite deformation theory of higher-order gradient crystal plasticity // *J. Mech. Phys. Solids*. – 2008. – Vol.56. – P.2573–2584.
320. Lapovok R. e.a. Asymmetric rolling of interstitial-free steel using one idle roll / Lapovok R., Orlov D., Timokhina I.B., Pougis A., Toth L.S., Hodgson P.D., Haldar A., Bhattacharjee D. // *Metallurgical and Materials Trans. A*. – 2012. – Vol.43A. – P.1328–1340.
321. Lebensohn R.A. e.a. Full-field vs. homogenization methods to predict microstructure–property relations for polycrystalline materials / Lebensohn R.A., Ponte Castañeda P., Brenner R., Castelnau O. // In: *Computational Methods for Microstructure-Property Relationships* (Eds. S. Ghosh and D. Dimiduk): Springer Science+Business Media, LLC, 2011. – P.393–441.

322. Lee E.H. Elastic plastic deformation at finite strain // ASME J. Appl. Mech. – 1969. – Vol.36. – P.1–6.
323. Lee E.H., Liu D.T. Finite-strain elastic-plastic theory with application to plane-wave analysis // J. Appl. Phys. – 1967. – Vol.38. – P.19–27.
324. Leffers T., Ray R.K. The brass-type texture and its deviation from the copper-type texture // Prog. Mater Sci. – 2009. – Vol.54. – P.351–396.
325. Lehmann T. Anisotrope plastische Formänderungen // Romanian J. Techn. Sci. Appl. Mech. – 1972. – Vol.17. – P.1077–1086.
326. Li D., Lin D. Microstructure evolution and activation energy during superplastic deformation of FeAl based intermetallics // Scripta Materialia. – 1997. – Vol.36, No.11. – Pp.1289–1294.
327. Li F., Roberts W.T., Bate P.S. Superplasticity and the development of dislocation structures in an Al-4.5% Mg alloy // Acta mater. – 1996. – Vol.44, No.1. – Pp.217–233.
328. Li S. Application of crystal plasticity modeling in equal channel angular extrusion // Trans. Nonferrous Met. Soc. China. – 2013. – Vol.23. – P.170–179.
329. Li S. Orientation stability in equal channel angular extrusion. Part I: Face-centered cubic and body-centered cubic materials// Acta Materialia. – 2008. – Vol. 56. – Pp. 1018–1030.
330. Lim H. e.a. A multi-scale model of dislocation plasticity in α -Fe: Incorporating temperature, strain rate and non-Schmid effects / Lim H., Hale L.M., Zimmerman J.A., Battaile C.C., Weinberger C.R. // Int. J. Plasticity. – 2015. – Vol.73. – P.100–118.
331. Lim H. e.a. A physically based model of temperature and strain rate dependent yield in BCC metals: Implementation into crystal plasticity / Lim H., Battaile C.C., Carroll J.D., Boyce B.L., Weinberger C.R. // J. Mech. Phys. Solids. – 2015. – Vol.74. – P.80–96.
332. Lin T.H. Analysis of elastic and plastic strains of a face – centered cubic crystal // J. Mech. Phys. Solids. – 1957. – Vol.5, Is.1. – P.143–149.
333. Lubarda V.A. Elastoplasticity theory. – Boca Raton, London, New York, Washington: CRC Press LLC, 2002. – 627 p.

334. M'Guil S. e.a. A comparison of viscoplastic intermediate approaches for deformation texture evolution in face-centered cubic polycrystals / M'Guil S., Ahzi S., Youssef H., Baniassadi M., Gracio J.J. // *Acta Mater.* – 2009. – Vol.57. – P.2496–2508.
335. M'Guil S., Ahzi S., Khaleel M.A. An intermediate viscoplastic model for deformation texture evolution in polycrystals // *Proceed. ICOTOM 14. Leuven. Belgium, 2005.* – P.989–994.
336. Ma A., Roters F., Raabe D. A dislocation density based constitutive model for crystal plasticity FEM including geometrically necessary dislocations // *Acta Materialia.* – 2006a. – Vol.54 – P.2169–2179.
337. Ma A., Roters F.A. A constitutive model for fcc single crystals based on dislocation densities and its application to uniaxial compression of aluminium single crystals // *Acta Materialia.* – 2004. – Vol.52 – P.3603–3612.
338. Mahesh S. e.a. Application of a substructure-based hardening model to copper under loading path changes / Mahesh S., Tome C.N., McCabe R.J., Kaschner G.C., Beyerlein I.J., Misra A. // *Metallurgical and Mater. Trans. A.* – 2004. – Vol.35A. – P.3763–3774.
339. Mandel J. Equations constitutives et directeurs dans les milieux plastiques et viscoplastiques // *Int. J. Solids Structures.* – 1973. – Vol.9. – P.725–740.
340. Mánik T., Holmedal B. Review of the Taylor ambiguity and the relationship between rate-independent and rate-dependent full-constraints Taylor models // *Int. J. Plasticity.* – 2014. – Vol.55. – P.152–181.
341. Mareau C., Favier V., Berveiller M. Micromechanical modeling coupling time-independent and time-dependent behaviors for heterogeneous materials // *Int. J. Solids and Structures.* – 2009. – Vol.46. – P.223–237.
342. Masimo M., Sachs G.O. Mechanische Eigenschaften von Messingkristallen // *Z. Physik.* – 1928. – B.50. – S.161–186.
343. Maugin G.A. The saga of internal variables of state in continuum thermomechanics (1893-2013) // *Mechanics Research Communications.* – 2015. – Vol.69. – P.79–86.

344. Maugin G.A. The thermomechanics of plasticity and fracture. – Cambridge University Press, 1992. — 368 p.
345. Mayeur J.R. e.a. A crystal plasticity study of heterophase interface character stability of Cu/Nb bicrystals / Mayeur J.R., Beyerlein I.J., Bronkhorst C.A., Mourad H.M., Hans B.L. // *Int. J. Plasticity*. – 2013. – Vol.48. – P.72–91.
346. Mayeur J.R., McDowell D.L. A comparison of Gurtin type and micropolar theories of generalized single crystal plasticity // *Int. J. Plasticity*. – 2014. – Vol.57. – P.29–51.
347. Mayeur J.R., McDowell D.L. A three-dimensional crystal plasticity model for duplex Ti–6Al–4V // *Int. J. Plasticity*. – 2007. – Vol.23. – P.1457–1485.
348. Mazilkin A.A., Myshlyaev M.M. Microstructure and thermal stability of superplastic aluminium-lithium alloy after severe plastic deformation // *J. Mater. Sci.* – 2006. – Vol.41. – P.3767–3772.
349. McDowell D. L. Viscoplasticity of heterogeneous metallic materials // *Mater. Sci. Eng. R.* – 2008. – Vol.62. – P.67–123.
350. McDowell D.L. A perspective on trends in multiscale plasticity // *Int. J. Plasticity*. – 2010. – Vol.26. – P.1280–1309.
351. McDowell D.L. Internal state variable theory// In: *Handbook of Materials Modeling*, S. Yip (ed.). – Springer, 2005. – P.1151–1169.
352. McGinty R.D., McDowell D.L. A semi-implicit integration scheme for rate independent finite crystal plasticity // *Int. J. Plasticity*. – 2006. – Vol.22. – P.996–1025.
353. Menzel A. Relations between material, intermediate and spatial generalized strain measures for anisotropic multiplicative inelasticity // *Acta Mechanica*. – 2006. – Vol.182. – P.231–252.
354. Mesarovic S.Dj. Plasticity of crystals and interfaces: from discrete dislocations to size-dependent continuum theory // *Theoret. Appl. Mech.*– 2010. – Vol.37, No.4. – P.289–332.
355. Michel J.C., Suquet P. Nonuniform transformation field analysis // *Int. J. Solids and Struct.* – 2003. – Vol.40. – P.6937–6955.

356. Miehe C. Multisurface thermoplasticity for single crystals at large strains in terms of Eulerian vector updates // *Int. J. Solids and Struct.* – 1996. – Vol.33, No.20–22. – P.3103–3130.
357. Mroz Z. On the description of anisotropic work – hardening // *J. Mech. Phys. Solids.* – 1967. – Vol. 15. – No. 3. – P. 163–175.
358. Musin F. e.a. High strain rate superplasticity in an Al-Li-Mg alloy subjected to equal-channel angular extrusion / Musin F., Kaibyshev R., Motohashi Y., Sakuma T., Itoh G. // *Materials Transactions.* – 2002. – Vol. 43, No. 10. – Pp. 2370-2377.
359. Nagtegaal J.C., de Jong J.E. Some aspects of non-isotropic workhardening in finite strain plasticity / In: *Plasticity of Metals at Finite Strain, Theory, Computation and Experiment.* Lee, E.H., Mallett, R.L. (Eds.). – Stanford: Stanford University, 1982. – P.65–106.
360. Neale K.W. Use of crystal plasticity in metal forming simulations // *Int. J. Mech. Sci.* – 1993. – Vol.35(12). – P.1053–1063.
361. Neil C.J. e.a. Modeling lattice strain evolution at finite strains and experimental verification for copper and stainless steel using in situ neutron diffraction / Neil C.J., Wollmershauser J.A., Clausen B., Tomé C.N., Agnew S.R. // *Int. J. Plasticity.* – 2010. – Vol.26, No.12. – P.1772–1791.
362. Neishi K., Horita Z., Langdon T.G. Achieving superplasticity in a Cu-40% Zn alloy through severe plastic deformation // *Scripta Materialia.* – 2001. – Vol.45 (8). – P.965–970.
363. Nye J.F. Some geometrical relations in dislocated crystals // *Acta Metall.* –1953. – Vol.1. – P.153–162.
364. Orowan E. Problems of plastic gliding // *Proc. Phys. Soc.* – 1940. – Vol.62. – P.8–22.
365. Ostanina T.V., Shveykin A.I., Trusov P.V., Makarevich E.S. Grain structure refinement description in the two-level statistical crystal plasticity model // *IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering.* – 2019. – Vol. 581. – 012018.
366. Ostanina T.V., Telkanov M.A., Makarevich E.S., Trusov P.V., Shveykin A.I. Grain structure refinement modeling in inelastic deformation of metals and alloys// *AIP Conference Proceedings.* – 2017. – V.1909. – 020160.

367. Padmanabhan K. A., Davies G. J. Rheological analysis of superplasticity in metallic materials // *Rheol. Acta.* – 1974. – Vol.13. – Pp.434-442.
368. Patra A., Zhu T., McDowell D.L. Constitutive equations for modeling non-Schmid effects in single crystal bcc-Fe at low and ambient temperatures // *Int. J. Plasticity.* – 2014. – Vol.59. – P.1–14.
369. Peeters B. e.a. Teilor ambiguity in b.c.c polycrystals: a non–problem if substructural anisotropy is considered / Peeters B., Seefeldt M., Van Houtte P., Aernoudt E. // *Scripta Mater.* – 2001. – Vol.45. – P.1349–1356.
370. Peeters B. e.a. Work hardening–softening behaviour of b.c.c polycrystals during changing strain paths: II. TEM observations of dislocation sheets in an IF steel during two–stage strain paths and their representation in terms of dislocation densities / Peeters B., Bacroix B., Teodosiu C., Van Houtte P., Aernoudt E. // *Acta Mater.* – 2001. – Vol.49. – P.1621–1632.
371. Perez-Prado M.T., Gonzalez-Doncel G. Texture changes during deformation of a 7475 superplastic aluminum sheet alloy // *Textures and Micro-structures.* – 2000. – Vol.34. – Pp.33–42.
372. Pokharel R. e.a. Polycrystal plasticity: comparison between grain-scale observations of deformation and simulations / Pokharel R., Lind J., Kanjarla A.K., Lebensohn R.A., Li S.F., Kenesei P., Suter R.M., Rollett A.D. // *Annu. Rev. Condens.Matter Phys.* – 2014. – Vol.5. – P.317–346.
373. Poulat S., Decamps B., Priester L. In-situ transmission electron microscopy study of the dislocation accommodation in [101] tilt grain boundaries in nickel bicrystals // *Philosophical magazine A.* – 1999. – Vol. 79, No. 11. – P. 2655–2680.
374. Prakash A., Lebensohn R.A. Simulation of micromechanical behavior of polycrystals: finite elements versus fast Fourier transforms // *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* – 2009. – Vol.17. – 064010 (16 p.)
375. Pumphrey P. Observations of the interaction of lattice dislocations with high angle grain boundaries // *Journal de Physique Colloques.* – 1975. – Vol.36 (C4). – P.C4-23–C4-33.

376. Qu J., Xu B., Jin Q. Parameter identification method of large macro-micro coupled constitutive models based on identifiability analysis // CMC. – 2010. – Vol. 20, No. 2. – P. 119-157.
377. Rabinovich M.Kh., Markushev M.V., Murashkin M.Yu. Effect of initial structure on grain refinement to submicron size in Al-Mg-Li alloy processed by severe plastic deformation // Materials Science Forum. – 1997. – Vols.243-245. – P. 591-596.
378. Reinhardt W.D., Dubey R.N. Application of objective rates in mechanical modeling of solids // Trans. ASME. J. Applied Mechanics. – 1996. – Vol.118. – P.692–698.
379. Reinhardt W.D., Dubey R.N. Coordinate-independent representation of spins in continuum mechanics // J. Elasticity. – 1996. – Vol.42. – P.133–144.
380. Rice J.R. Inelastic constitutive relations for solids: an internal-variable theory and its application to metal plasticity // J. Mech. Phys. Solids. – 1971. – Vol.19. – P.433–455.
381. Rogovoy A. Formalized approach to construction of the state equations for complex media under finite deformations// Continuum Mech. Thermodyn. – 2012. – Vol. 24. – P. 81–114.
382. Rollett A.D. Overview of modeling and simulation of recrystallization // Progress in materials science. – 1997. – Vol.42, No. 1–4. – C.79–99.
383. Romano G., Barretta R. Covariant hypo-elasticity // Europ. J. Mechanics A/Solids. – 2011. – Vol.30. – P.1012–1023.
384. Romano G., Barretta R., Diaco M. The geometry of nonlinear elasticity // Acta Mech. – 2014. – Vol.225, Is.11. – P.3199–3235.
385. Roters F. Advanced Material Models for the Crystal Plasticity Finite Element Method: Development of a general CPFEM framework. – RWTH Aachen: Aachen, 2011. – 226 p.
386. Roters F. e.a. Crystal Plasticity Finite Element Methods in Materials Science and Engineering / Roters F., Eisenlohr P., Bieler T.R., Raabe D. – WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2010. – 209 p.

387. Roters F. e.a. Overview of constitutive laws, kinematics, homogenization and multiscale methods in crystal plasticity finite-element modeling: Theory, experiments, applications / Roters F., Eisenlohr P., Hantcherli L., Tjahjanto D.D., Bieler T.R., Raabe D. // *Acta Materialia*. – 2010. – Vol.58 – P.1152–1211.
388. Rousselier G., Leclercq S. A simplified “polycrystalline” model for viscoplastic and damage finite element analyse // *Int. J. Plasticity*. – 2006. – Vol.22. – P.685–712.
389. Rubin M.B. On the treatment of elastic deformation in finite elastic-viscoplastic theory // *Int. J. Plasticity*. – 1996. – Vol.12 (7). – P.951–965.
390. Rubin M.B. Physical reasons for abandoning plastic deformation measures in plasticity and viscoplasticity theory // *Arch. Mech.* – 2001. – Vol.53 (4–5). – P.519–539.
391. Rubin M.B. Plasticity theory formulated in terms of physically based microstructural variables – Part I. Theory // *Int. J. Solids Structures*. –1994. – Vol.31 (19). – P.2615–2634.
392. Rubin M.B. Plasticity theory formulated in terms of physically based microstructural variables – Part II. Examples // *Int. J. Solids Structures*. –1994. – Vol.31 (19).– P.2635–2652.
393. Saai A. e.a. Experimental and numerical study of the thermo-mechanical behavior of Al bi-crystal in tension using full field measurements and micromechanical modeling / Saai A., Louche H., Tabourot L., Chang H.J. // *Mechanics of Materials*. – 2010. – Vol.42. – P.275–292.
394. Sachs G. Zur Ableitung einer Fließbedingung // *Z. Verein Deut. Ing.* – 1928. – B.72. – S.734–736.
395. Sakai G., Horita Z., Langdon T.G. Grain refinement and superplasticity in an aluminum alloy processed by high-pressure torsion // *Materials Science and Engineering A*. – 2005. – Vol.393. – P.344–351.
396. Saltelli A., Ratto M., Andres T., Campolongo F., Cariboni J., Gatelli D., Saisana M., Tarantola S. *Global sensitivity analysis. The Primer*. – England: John Wiley & Sons Ltd. – 2008. – 292 p.

397. Saltelli A., Ratto M., Tarantola S., Campolongo F. Sensitivity analysis practices: strategies for model-based inference // *Reliab. Eng. Syst. Saf.* – 2006. – Vol. 91. – P. 1109-1125.
398. Sai K. Multi-mechanism models: Present state and future trends // *Int. J. Plasticity.* – 2011. – Vol.27. – P.250–281.
399. Schröder J., von Hoegen M., Neff P. The exponentiated Hencky energy: Anisotropic extension and case studies // *Comput. Mech.* – 2018. – Vol.61, Is.6. – P.657–685.
400. Sergueeva A.V., Stolyarov V.V., Valiev R.Z., Mukherjee A.K. Superplastic behaviour of ultrafine-grained Ti–6Al–4V alloys // *Materials Science and Engineering A.* – 2002. – Vol.A323. – P.318–325.
401. Sharifullina E.R., Shveykin A.I., Trusov P.V. Multilevel model for description of material deformation under structural superplasticity conditions: modified kinetic equations // *AIP Conference Proceedings.* – 2018. – Vol. 2051. – 020277.
402. Sharifullina E.R., Shveykin A.I., Trusov P.V. Multilevel model of polycrystalline materials: grain boundary sliding description // *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering.* – 2017. – Vol.286. – 012026.
403. Shin D.H., Lee C.S., Kim W.J. Superplasticity of fine-grained 7475 Al alloy and a proposed new deformation mechanism // *Acta mater.* – 1997. – Vol.45, No.12. – P.5195-5202.
404. Shutov A.V., Ihlemann J. Analysis of some basic approaches to finite strain elastoplasticity in view of reference change // *Int. J. Plasticity.* – 2014. – Vol.63. – P.183–197.
405. Shveykin A.I., Sharifullina E.R. Development of multilevel models based on crystal plasticity: description of grain boundary sliding and evolution of grain structure// *Nanomechanics Science and Technology: An International Journal.* – 2015. – Vol. 6, Iss.4. – Pp. 281–298.
406. Shveykin A.I., Trusov P.V. Multilevel models of polycrystalline metals: comparison of relations describing the rotations of crystallite lattice// *Nanoscience and Technology: An International Journal.* – 2019. – Vol.10, Iss.1. – Pp.1–20.

407. Shveykin A.I., Trusov P.V., Volegov P.S. Polycrystals multilevel models using crystal plasticity: consistency of constitutive equations at different scale levels// Journal of Physics: Conference Series. – 2014. – Vol.490. – 012166.
408. Simo J.C., Ortiz M. A unified approach to finite deformation elastoplastic analysis based on the use of hyperelastic constitutive equations // Comput. Meths. Appl. Mech. Engrg. – 1985. – Vol.49. – P.221–245.
409. Simo J.C., Pister K.S. Remarks on rate constitutive equations for finite deformation problems: computational implications // Comput. Methods Appl. Mech. Eng. – 1984. – Vol.46 (2). – P.201–215.
410. Stainier L., Cuitiño A.M., Ortiz M. A micromechanical model of hardening, rate sensitivity and thermal softening in bcc single crystals // J. Mech. Phys. Solids. – 2002. – Vol.50. – P.1511–1545.
411. Staroselsky A., Anand L. Inelastic deformation of polycrystalline face centered cubic materials by slip and twinning // J. Mech. Phys. Solids. – 1998. –Vol.46, No.4. – P.671–696.
412. Staroselsky A., Cassenti B.N. Creep, plasticity, and fatigue of single crystal superalloy // Int. J. Solids and Struct. – 2011. – Vol.48. – P.2060–2075.
413. Staroselsky A., Cassenti B.N. The application of the combined creep and rate-independent plasticity model to turbine components life prediction / Experimental and Applied Mechanics, Volume 4: Proceedings of the 2012 Annual Conference on Experimental and Applied Mechanics. C.E. Ventura et al. (eds.), 2013. – P.213–219.
414. Svendsen B., Bargmann S. On the continuum thermodynamic rate variational formulation of models for extended crystal plasticity at large deformation // J. Mech. Phys. Solids. – 2010. – Vol.58, Is.9. – P.1253–1271.
415. Tan J.C., Tan M.J. Superplasticity and grain boundary sliding characteristics in two stage deformation of Mg-3Al-1Zn alloy sheet // Materials Science and Engineering A339. – 2003. – P. 81-89.
416. Taylor G.I. Plastic strain in metals // J. Inst. Metals. – 1938. – Vol.62. – P.307–324.
417. Taylor G.I., Elam C.F. The distortion of an aluminium crystal during a tensile test // Proc. Roy. Soc. Ser. A. (London). – 1923. –Vol.102. – P.643–647.

418. Tokuda M., Kratochvil J. Prediction of subsequent yield surface by a simple mechanical model of polycrystal // *Arch. Mech.* – 1984. – Vol.36, No.5–6. – P.661–672.
419. Tokuda M., Kratochvil J., Ohashi Y. On mechanism of induced plastic anisotropy of polycrystalline metals // *Bull. JSME.* – 1982. – Vol.25, No.208. – P.1491–1497.
420. Tokuda M., Kratochvil J., Ohno N. Inelastic behaviour of polycrystalline metals under complex loading condition // *Int. J. Plasticity.* –1985. – Vol.1. – P.141–150.
421. Tokuda M., Ohno N., Kratochvil J. Unified constitutive equations for inelastic behaviours of polycrystalline metals based on a semi-micro approach // *Proc. Int. Conf. On Creep.* – Tokyo, 1986. – P.411–416.
422. Tomé C., Kocks U. F. The yield surface of H.C.P. crystals // *Acta metall.* – 1985. – Vol.33, No.4. – P.603–621.
423. Tóth L. S. e.a. A model of grain fragmentation based on lattice curvature / Tóth L. S., Estrin Y., Lapovok R., Gu C. // *Acta Materialia.* – 2010. –Vol.58. – P.1782–1794.
424. Tóth L.S., Molinari A., Estrin Y. Strain hardening at large strains as predicted by dislocation based polycrystal plasticity model // *J. Engng. Materials and Technology.* – 2002. – Vol.124. – P.71–77.
425. Truesdell C., Noll W. *The non-linear field theories of mechanics.* – Springer: Berlin, 1965. – 602 p.
426. Trusov P., Sharifullina E., Shveykin A. Three-level modeling of fcc polycrystalline inelastic deformation: grain boundary sliding description // *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering.* – 2015. – Vol.71. – 012081.
427. Trusov P.V., Shveykin A.I., Kondratev N.S. Multilevel metal models: formulation for large displacements gradients // *Nanoscience and Technology: An International Journal.* – 2017. – Vol. 8, Iss. 2. – Pp. 133–166.
428. Trusov P.V., Shveykin A.I., Kondratev N.S., Sharifullina E.R., Yants A.Yu. Multilevel models of polycrystalline metals and alloys: formulation of geometrically nonlinear kinematic and constitutive relations// *AIP Conference Proceedings.* – 2016. – Vol.1783. – 020226.

429. Trusov P.V., Shveykin A.I., Sharifullina E.R., Kondratev N.S. Model of polycrystalline inelastic deformation with grain boundary sliding description // *Advanced Materials Research*. – 2014. – Vol.1040. – Pp.86–91.
430. Trusov P.V., Shveykin A.I., Yants A.Yu. Multilevel geometrically nonlinear models of polycrystalline metals and alloys // *AIP Conference Proceedings*. – 2017. – V.1909. – 020221.
431. Trusov P.V., Volegov P.S., Shveykin A.I. Multilevel model of inelastic deformation of FCC polycrystalline with description of structure evolution// *Computational Materials Science*. – 2013. – Vol. 79. – Pp. 429-441.
432. Ulz M.H. A finite isoclinic elasto-plasticity model with orthotropic yield function and notion of plastic spin // *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* – 2011. – Vol.200. – P.1822–1832.
433. Vakhrouchev A.V. Modelling of the nanosystems formation by the molecular dynamics, mesodynamics and continuum mechanics methods // *Multidiscipline Modeling in Materials and Structures*. – 2009. – Vol. 5, No. 2. – Pp. 99-118.
434. Valanis K.C. A theory of viscoplasticity without a yield surface. Part I: General theory // *Arch. Mech. Stosow.* – 1971. – Vol. 23. – No. 4. – P. 517–533.
435. Valanis K.C. A theory of viscoplasticity without a yield surface. Part II: Application to the mechanical behavior of metals // *Arch. Mech. Stosow.* – 1971. – Vol. 23. – No. 4. – P. 535–551.
436. Van Boxel S. e.a. Slip system based model for work hardening of aluminium, including transient effects during strain path changes / Van Boxel S., Seefeldt M., Verlinden B., Van Houtte P. // *Вопросы материаловедения*. – 2007. – №4 (52). – P.111–117.
437. Van Houtte P. Calculation of the yield locus of textured polycrystals using the Taylor and the relaxed Taylor theory // *Textures and Microstructures*. – 1987. – Vol.7. – P.29–72.
438. Van Houtte P. e.a. Application of yield loci calculated from texture data / Van Houtte P., Mols K., Van Bael A., Aernoudt E. // *Textures and Microstructures*. – 1989. – Vol.11. – P.23–39.

439. Van Houtte P. e.a. Deformation texture prediction: from the Taylor model to the advanced Lamel / Van Houtte P., Li S., Seefeldt M., Delannay L. // *Int. J. Plasticity*.—2005a. – Vol.21. – P.589–624.
440. Van Houtte P., Delannay L., Samajdar I. Quantitative prediction of cold rolling textures in low-carbon steel by means of the LAMEL model // *Textures and Microstructures*. – 1999. – Vol.31. – P.109–149.
441. Vasin R.A. e.a. Mechanical modelling of the universal superplastic curve / Vasin R.A., Enikeev F.U., Mazurski M.I., Munirova O.S. // *J. Materials Sci.* – 2000. – Vol.35. – Pp.2455 – 2466.
442. Watanabe H., Mukai T. Superplasticity in a ZK60 magnesium alloy at low temperatures // *Scripta Materialia*. – 1999. – Vol.40 (4). – P.477–484.
443. Watanabe I., Setoyama D. Multiscale characterization of a polycrystalline aggregate subjected to severe plastic deformation with the finite element method // *Materials Transactions. Special Issue on Advanced Materials Science in Bulk Nanostructured Metals III*. – 2016. – P.1–7.
444. Weng G.J. Dislocation theories of work hardening and yield surfaces of single crystals // *Acta Mechanica*. – 1980. – Vol.37, No.3–4. – P.217–230.
445. Weng G.J. The yield surface of single crystals at arbitrary strain // *Acta Mechanica*. – 1980. – Vol.37, No.3–4. – P.231–245.
446. Xiao H., Bruhns O.T., Meyers A. A natural generalization of hypoelasticity and Eulerian rate type formulation of hyperelasticity // *J. Elasticity*. – 1999. – Vol.56. – P.59–93.
447. Xiao H., Bruhns O.T., Meyers A. Consistent finite elastoplasticity theory combining additive and multiplicative decomposition of the stretching and the deformation gradient // *Int. J. Plasticity*. – 2000. – Vol.16. – P.143–177.
448. Xiao H., Bruhns O.T., Meyers A. Hypo-elasticity model based upon the logarithmic stress rate // *J. Elasticity*. – 1997. – Vol.47. – P.51–68.
449. Xiao H., Bruhns O.T., Meyers A. Objective corotational rates and unified work-conjugacy relation between Eulerian and Lagrangean strain and stress measures // *Arch. Mech.* – 1998. – Vol.50, No.6. – P.1015–1045.

450. Xiao H., Bruhns O.T., Meyers A. Objective stress rates, path-dependence properties and non-integrability problems // *Acta Mechanica*. – 2005. – Vol.176. – P.135–151.
451. Xiao H., Bruhns O.T., Meyers A. The choice of objective rates in finite elastoplasticity: general results on the uniqueness of the logarithmic rate // *Proc. Roy. Soc. Lond. A*. – 2000. – Vol. 456. – P.1865–1882.
452. Xiao H., Bruhns O.T., Meyers A. The integrability criterion in finite elastoplasticity and its constitutive implications // *Acta Mechanica*. – 2007. – Vol.188. – P.227–244.
453. Yakovtseva O.A., Mikhaylovskaya A.V., Kotov A.D., Portnoi V.K. Effect of alloying on superplasticity of two-phase brasses // *The Physics of Metals and Metallography*. – 2016. – Vol.117 (7). – Pp.765-772.
454. Yalcinkaya T., Brekelmans W.A., Geers M.G.D. Deformation patterning driven by rate dependent non-convex strain gradient plasticity // *J. Mech. Phys. Solids*. – 2011. – Vol.59. – P.1–17.
455. Yalcinkaya T., Brekelmans W.A.M., Geers M.G.D. BCC single crystal plasticity modeling and its experimental identification // *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* – 2008. – Vol.16. – 085007 (16 p.).
456. Yang Z., Elgamal A. Application of unconstrained optimization and sensitivity analysis to calibration of a soil constitutive model // *Int. J. Numer. Anal. Meth. Geomech.* – 2003. – Vol. 27, No. 15. – P. 1277-1297.
457. Ye L., Zhang X., Zheng D., Liu S., Tang J. Superplastic behavior of an Al-Mg-Li alloy // *Journal of Alloys and Compounds*. – 2009. – Vol.487. – P.109–115.
458. Zaremba S. Sur une forme perfectionnée de la théorie de la relaxation // *Bull. Int. Acad. Sci. Cracovie*. – 1903. – P.595–614.
459. Zehetbauer M. Cold work hardening in stages IV and V of f.c.c. metals – II. Model fits and physical results // *Acta metal. mater.* – 1993. – Vol.41, No.2. – P.589–599.
460. Zhang K. e.a. Multi-level modelling of mechanical anisotropy of commercial pure aluminium plate: Crystal plasticity models, advanced yield functions and parameter identification / Zhang K., Holmedal B., Hopperstad O.S., Dumoulin S., Gawad J., Van Bael A., Van Houtte P. // *Int. J. Plasticity*. – 2015 – Vol.66. – P.3–30.

461. Zhang X. e.a. Superplastic deformation behavior and mechanism of 1420 Al-Li alloy sheets with elongated grains / Zhang X., Zheng D., Ye L., Tan J. // *J. Cent. South Univ. Technol.* – 2010. – Vol.17. – P. 659–665.
462. Zhao D. e.a. Modeling and experimental verification of thermo-mechanical coupled behavior of face-centered-cubic polycrystals / Zhao D., Zhu Y., Ying L., Hu P., Zhang W. // *Materials and Design.* – 2013. – Vol.52. – P.289–294.
463. Zhao J., Sheng D. Strain gradient plasticity by internal-variable approach with normality structure // *Int. J. Solids and Structures.* – 2006. – Vol.43. – P.5836–5850.
464. Zhilin P.A. e.a. Material strain tensors / Zhilin P.A., Altenbach H., Ivanova E.A., Krivtsov A. // In: *Generalized Continua as Models for Materials*. Edited by H. Altenbach et al. – Berlin, Heidelberg, New York: Springer, 2013. – P.321–331.
465. Zhou Y., Neale K.W., Tóth L.S. A modified model for simulating latent hardening during the plastic deformation of rate-dependent FCC polycrystals // *Int. J. Plasticity.* – 1993. – Vol.9. – P.961–978.
466. Zhu Y. e.a. Thermo-mechanically coupled cyclic elasto-viscoplastic constitutive model of metals: Theory and application / Zhu Y., Kang G., Kan Q., Bruhns O.T., Liu Y. // *Int. J. Plasticity.* – 2016. – Vol.79. – P.111–152.
467. Zuo Q.H. On the uniqueness of a rate-independent plasticity model for single crystals // *Int. J. Plasticity.* – 2011. – Vol.27. – P.1145–1164.