

На правах рукописи



Швейкин Алексей Игоревич

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

01.02.04 – механика деформируемого твердого тела

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Пермь – 2019

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Пермский национальный исследовательский политехнический университет» (ПНИПУ).

Научный консультант: **Трусов Петр Валентинович**,
доктор физико-математических наук,
профессор.

Официальные оппоненты: **Волков Александр Евгеньевич**,
доктор физико-математических наук,
профессор кафедры теории упругости
Федерального государственного бюджетного
образовательного учреждения высшего
образования «Санкт-Петербургский
государственный университет»,

Коновалов Анатолий Владимирович,
доктор технических наук, профессор,
заведующий лабораторией механики деформаций
Федерального государственного бюджетного
учреждения науки Институт машиноведения
Уральского отделения Российской академии
наук, г. Екатеринбург,

Маркин Алексей Александрович,
доктор физико-математических наук, профессор,
профессор кафедры «Вычислительная механика и
математика» Федерального государственного
бюджетного образовательного учреждения выс-
шего образования «Тульский государственный
университет».

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное
учреждение науки Институт физики прочности и
материаловедения Сибирского отделения
Российской академии наук, г.Томск.

Защита состоится **15 января 2020 г.** в 14:00 часов на заседании диссертационного совета Д 004.036.01 на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Пермский федеральный исследовательский центр Уральского отделения Российской академии наук (филиал – Институт механики сплошных сред УрО РАН) по адресу: 614013, г. Пермь, ул. Академика Королёва, 1; тел: (342) 237-84-61; факс: (342) 237-84-87; сайт: www.icmm.ru.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте Института механики сплошных сред Уральского отделения Российской академии наук (www.icmm.ru).

Автореферат разослан «___» ноября 2019 года.

Ученый секретарь
диссертационного совета Д 004.036.01,
доктор физико-математических наук, доцент



А.Л. Зуев

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

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 являются отражением состояния 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.

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 физического 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 [1, 7]). 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 совокупностью 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. Отдельную группу составляют модели, являющиеся, по сути, развитием теории скольжения С.Б. Батдорфа и Б.А. Будянского, представленные в работах М.Я. Леонова, А.Н. Мохеля, Р.Л. Салганика, С.А. Христиановича, G. Rousselier, S. Leclercq 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 неупругого деформирования и их носителей – дефектов кристаллического строения; 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 увеличением компьютерных мощностей в последние десятилетия развитие данного направления происходит весьма интенсивно. Существенный вклад в совершенствование 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 [5, 6, 16]). 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 вызвано, 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 МДТТ 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.B. Rubin, C. Trusdell, H. Xiao, S. Zaremba и др. [12, 13, 16]). Однако стоит отметить, что подавляющее число известных работ посвящено формулировке соотношений для

упруго-изотропных материалов в рамках континуальной механики. 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 МДГТ 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 является задача 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. [18, 19]), позволяющих получать детали сложной формы малым числом операций с исключением сварки. 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 исследователями (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. [18, 19]). 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, отме-

чается стадийность кривой растяжения (стадия упруговязкопластичности с упрочнением, стадия «перехода» к структурной сверхпластичности, сам режим структурной сверхпластичности), изменение ролей отдельных физических механизмов и 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), актуально создание такой модели.

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 изменяющейся структуры материала, определяемых ее состоянием эффективных физико-механических свойств и механизмов деформирования на различных масштабных уровнях и их взаимодействий, 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 нагружениях,

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 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 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, удовлетворительно 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.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 для исследования 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. 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 (Сан-Паулу, 2012, 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. Трусков), 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 – в ведущих научных журналах, входящих в перечень рецензируемых научных изданий, установленный Министерством образования и науки 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, 9 статей – в сборниках материалов конференций, индексируемых в международных базах цитирования Scopus и/или Web of Science; получено 3 свидетельства о государственной регистрации программы для ЭВМ.

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).

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 наименования.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Введение содержит обоснование актуальности выбранной темы исследования и характеристику степени ее разработанности. Сформулированы цель и задачи работы. Освещены научная новизна, теоретическая и практическая значимость работы, подходы и методы исследования, положения, выносимые на защиту. Приведена информация о степени достоверности и об апробации результатов. Представлено краткое описание содержания глав диссертационной работы.

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-имитационном, физическом). Отмечается, что существенным недостатком макрофеноменологических моделей с позиции их применимости для исследования технологических процессов, помимо неспособности описать изменение структуры, является необходимость проведения экспериментов для (теоретически – бесконечно) большого числа вероятных траекторий нагружения и учета полученных данных в операторе модели. Обосновывается, что для решения поставленных в работе задач предпочтительно использовать физический подход с явным учетом механизмов деформирования.

В п.1.2 подробно описывается формализм данного 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 физического материаловедения эволюционных уравнений для этих параметров (краткий обзор приведен в [1, 7]). Введение необходимого числа внутренних переменных и соотношений для описания их эволюции позволяет вместо операторной или функциональной формы определяющих соотношений использовать системы (обыкновенных) дифференциальных и алгебраических соотношений. Стоит отметить, что в этом случае история воздействий не отбрасывается, она содержится в совокупности внутренних переменных.

В п.1.3 приводится краткий обзор способов построения многоуровневых моделей материалов в рамках указанного подхода, предложенных отечественными и зарубежными учеными. Приводятся основные характеристики физических теорий упруговязкопластичности (ФТП), которые базируются на явном рассмотрении физических механизмов неупругой деформации и их носителей – дефектов кристаллического строения. Проведен обзор пионерских и популярных в настоящее время моделей ФТП и основанных на них многоуровневых моделей для описания пластического деформирования поликристаллических металлов и сплавов различных классов – статистических, самосогласованных, прямых [5, 6, 16]. Отмечено, что

для моделирования технологических процессов наиболее эффективными в настоящее время являются статистические модели.

Обозначены основные нерешенные вопросы, возникающие при построении многоуровневых моделей поликристаллических металлов и сплавов, связанные в первую очередь со сложностью построения моделей на стыке механики и физики твердого тела (мезомеханики).

Во **второй главе** рассмотрены двухуровневые статистические конститутивные модели поликристаллических металлов.

В п.2.1 описывается структура двухуровневой модели неупругого деформирования поликристаллов. Далее все величины макроуровня обозначены заглавными буквами, мезоуровня – аналогичными строчными.

В качестве соотношения для связи скоростей изменения мер напряженно-деформированного состояния (НДС) на макроуровне используется закон Гука в скоростной релаксационной форме в терминах актуальной конфигурации [7]:

$$\mathbf{K}^{\text{cor}} \equiv \dot{\mathbf{K}} - \bar{\mathbf{\Omega}} \cdot \mathbf{K} + \mathbf{K} \cdot \bar{\mathbf{\Omega}} = \bar{\mathbf{\Pi}} : \mathbf{Z}^e = \bar{\mathbf{\Pi}} : (\hat{\mathbf{V}}\mathbf{V}^T - \bar{\mathbf{\Omega}} - \mathbf{Z}^{\text{in}} - \mathbf{Z}^{\text{th}}), \quad (2.1)$$

где $\mathbf{K}^{\text{cor}} \equiv \dot{\mathbf{K}} - \bar{\mathbf{\Omega}} \cdot \mathbf{K} + \mathbf{K} \cdot \bar{\mathbf{\Omega}}$ – объективная скорость изменения меры напряженного состояния, \mathbf{K} – взвешенный тензор напряжений Кирхгоффа, $\bar{\mathbf{\Omega}}$ – тензор спина квазитвердого движения макроуровня, $\bar{\mathbf{\Pi}}$ – тензор эффективных упругих свойств макроуровня, $\mathbf{Z} \equiv \hat{\mathbf{V}}\mathbf{V}^T - \bar{\mathbf{\Omega}}$ – индифферентная мера скорости полных деформаций на макроуровне [8], $\mathbf{L} = \hat{\mathbf{V}}\mathbf{V}^T$ – транспонированный градиент скорости перемещений, $\hat{\mathbf{V}}$ – набла-оператор в текущей лагранжевой системе координат. Принимается гипотеза об аддитивности упругих \mathbf{Z}^e , неупругих \mathbf{Z}^{in} и термических \mathbf{Z}^{th} составляющих меры скорости полных деформаций: $\mathbf{Z} = \mathbf{Z}^e + \mathbf{Z}^{\text{in}} + \mathbf{Z}^{\text{th}}$.

Значения внутренних переменных макроуровня ($\bar{\mathbf{\Omega}}, \bar{\mathbf{\Pi}}, \mathbf{Z}^{\text{in}}, \mathbf{Z}^{\text{th}}$) определяются с использованием соотношений мезоуровня. В рамках статистической модели в соответствие представителю объему (ПО) верхнего уровня ставится выборка элементов мезоуровня – кристаллитов (зерен, субзерен) [7]. При назначении воздействий для модели нижнего уровня используется обобщенная гипотеза Фойгта $\mathbf{I} = \mathbf{L}$ (равенство градиента скорости перемещений на мезоуровне соответствующей величине макроуровня), а также задание температуры θ и скорости ее изменения на мезоуровне равными соответствующим величинам макроуровня: $\theta = \Theta, \dot{\theta} = \dot{\Theta}$. В отличие от популярных статистических моделей на основе ФТП, не принимающих во внимание никаких взаимодействий зерен, в предлагаемых учитывается топология – их взаиморасположение в пространстве, что необходимо для описания зернограничного упрочнения и зернограничного скольжения в модели, применимой в более широких диапазонах воздействий (гл.6). Спин $\bar{\mathbf{\Omega}}$ и тензор упругих свойств $\bar{\mathbf{\Pi}}$ устанавливаются осреднением по ПО макроуровня соответствующих характеристик мезоуровня. Для определения неупругой \mathbf{Z}^{in} и термической \mathbf{Z}^{th} составляющих скорости деформации используются приведенные в данном разделе процедуры согласования определяющих соотношений уровней, обеспечивающие равенство макронапряжений \mathbf{K} осредненным мезонапряжениям \mathbf{k} [9]. В качестве отклика представительного макрообъема также определяется мощность теплового источника с помощью осреднения мощностей совокупности

внутренних тепловых источников за счет внутризеренного дислокационного скольжения (ВДС).

Для зерна (элемента мезоуровня) упругий закон в скоростной релаксационной форме в терминах актуальной конфигурации имеет вид:

$$\begin{aligned} \mathbf{k}^{cr} &= d\mathbf{k} / dt + \mathbf{k} \cdot \bar{\boldsymbol{\omega}} - \bar{\boldsymbol{\omega}} \cdot \mathbf{k} = \bar{\mathbf{p}}_{(cr)} : \mathbf{z}^e = \\ &= \bar{\mathbf{p}}_{(cr)} : (\mathbf{z} - \mathbf{z}^{in} - \mathbf{z}^{th}) = \bar{\mathbf{p}}_{(cr)} : \left(\hat{\mathbf{V}}\mathbf{v}^T - \bar{\boldsymbol{\omega}} - \sum_{k=1}^K \dot{\gamma}^{(k)} \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)} - \boldsymbol{\alpha} \dot{\theta} \right), \end{aligned} \quad (2.2)$$

где $\mathbf{k} = \begin{pmatrix} \circ \\ \rho / \hat{\rho} \end{pmatrix} \boldsymbol{\sigma}$ – взвешенный тензор напряжений Кирхгоффа, $\boldsymbol{\sigma}$ – тензор напряжений Коши, ρ , $\hat{\rho}$ – плотность материала кристаллита в отсчетной и актуальной конфигурациях, $\mathbf{k}^{cr} = d\mathbf{k} / dt + \mathbf{k} \cdot \bar{\boldsymbol{\omega}} - \bar{\boldsymbol{\omega}} \cdot \mathbf{k}$ – коротационная производная тензора Кирхгоффа, $\bar{\boldsymbol{\omega}}$ – спин квазитвердого движения мезоуровня, определяющий движение подвижной системы координат (ПСК), связанной с симметричными свойствами кристаллита (определение спина подробно обсуждается в главах 3 и 4), $\bar{\mathbf{p}}_{(cr)}$ – тензор упругих свойств кристаллита (компоненты которого постоянны в базе ПСК), $\hat{\mathbf{V}}\mathbf{v}^T = \dot{\mathbf{f}} \cdot \mathbf{f}^{-1}$ – градиент скорости перемещений, $\mathbf{z} = \hat{\mathbf{V}}\mathbf{v}^T - \bar{\boldsymbol{\omega}}$ – тензор меры скорости полных деформаций, определяемый наблюдателем в ПСК, \mathbf{z}^e – мера скорости упругих деформаций, $\mathbf{z}^{in} = \sum_{k=1}^K \dot{\gamma}^{(k)} \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)}$ – мера скорости неупругих деформаций, $\dot{\gamma}^{(k)}$, $\mathbf{b}^{(k)}$, $\mathbf{n}^{(k)}$ – скорость сдвига, направление сдвига и нормаль к плоскости сдвига в актуальной конфигурации для k -й системы внутризеренного скольжения краевых дислокаций (используется удвоенное число систем скольжения), $\boldsymbol{\alpha}$ – тензор термического расширения (компоненты которого постоянны в базе ПСК).

В п.2.2 приводятся соотношения для определения скорости неупругого деформирования кристаллита за счет ВДС.

Описывается разработанная упругопластическая модель мезоуровня, представляющая собой модификацию модели Линя для геометрически нелинейного случая [2–4]. При этой формулировке требуется нахождение изображающей точки в пространстве напряжений на поверхности текучести. Преимуществом этой модели является возможность интегрирования с большим шагом по времени, однако имеющиеся недостатки (сложность алгоритмической и программной реализации, особенно для случаев с неизотропным упрочнением; ограниченность диапазона применения, так как из рассмотрения исключаются вязкие эффекты, характерные для интенсивных пластических деформаций, особенно – при повышенных температурах) обусловили выбор для построения расширенных моделей (гл.6) вязкопластического соотношения [12, 14] для определения скоростей сдвигов ВДС:

$$\dot{\gamma}^{(k)} = \dot{\gamma}_0 \left(\tau^{(k)} / \tau_c^{(k)} \right)^m H(\tau^{(k)} - \tau_c^{(k)}), \quad k = 1, \dots, K, \quad (2.3)$$

где $\tau^{(k)}$, $\tau_c^{(k)}$ – сдвиговое и критическое сдвиговое напряжение на k -й системе скольжения краевых дислокаций, K – общее число систем скольжения, $\tau^{(k)} = \mathbf{k} : \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)}$, m – показатель скоростной чувствительности материала (параметр

модели), $H(\cdot)$ – функция Хэвисайда, $\dot{\gamma}_0$ – скорость сдвига по системе скольжения при достижении касательным напряжением критического напряжения сдвига. Были рассмотрены варианты определения $\dot{\gamma}_0$: постоянное значение и $\dot{\gamma}_0 = \alpha z_u$, где α – постоянный параметр модели, $z_u = \sqrt{2/3 \mathbf{z} : \mathbf{z}^T}$. Стоит отметить, что в последнем случае касательные напряжения стремятся к критическим при любом m , при постоянном $\dot{\gamma}_0$ данный эффект наблюдается при больших m (результаты соответствующих численных расчетов приведены в главе 4).

Критические напряжения $\tau_c^{(k)}$ являются одними из важнейших внутренних переменных моделей мезоуровня, определяются функцией накопленных к текущему моменту сдвигов по системам скольжения и истории их изменения. В п.2.2 приведены сведения о некоторых подходах к формулировке соотношений для определения $\tau_c^{(k)}$ [5, 6]. Вопрос построения этих соотношений находится за рамками данной работы, в качестве базового для установления критических напряжений при низких гомологических температурах используется соотношение¹:

$$\dot{\tau}_c^{(k)} = \sum_{l=1}^K h^{(kl)}(\boldsymbol{\sigma}) \dot{\gamma}^{(l)}, \quad h^{(kl)} = \left[q_{lat} + (1 - q_{lat}) \delta^{(kl)} \right] h^{(l)}, \quad h^{(l)} = h_0 \left| 1 - \tau_c^{(l)} / \tau_{sat} \right|^a, \quad (2.4)$$

где параметр латентного упрочнения q_{lat} принимает значение 1,0 для компланарных и 1,4 – для некопланарных систем скольжения (с номерами k и l), $\delta^{(kl)}$ – дельта Кронекера, параметры τ_{sat} , h_0 , a находятся из экспериментальных данных; в главе 6 описывается модификация (2.4) с учетом чувствительности к скорости деформации и температуре [19].

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. При формулировке краевой задачи в терминах отсчетной конфигурации основные сложности связаны с тем, что меры напряжений, скоростей напряжений и деформаций не имеют ясного физического смысла, что затрудняет построение определяющих соотношений. 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. В связи с этим 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). Существенным преимуществом формулировок определяющих соотношений в скоростной форме является также возможность аддитивного разложения скорости неупругой деформации на вклады от различных механизмов.

Использование соотношений формы (2.1),(2.2) с независимой от выбора системы отсчета (коротационной или конвективной) производной означает исполь-

¹ 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.

зование справедливых (верифицированных) для геометрически линейного приближения соотношений наблюдателем, который связан с ПСК. При любом выборе объективной производной обеспечивается выполнение принципа независимости определяющих соотношений от выбора системы отсчета, однако использование различных производных в определяющих соотношениях приводит к существенно отличающимся друг от друга результатам. 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, поэтому конвективные производные из рассмотрения исключены [12].

У популярных коротационных производных (Зарембы – Яуманна, Грина–Нагхди, логарифмической) имеются существенные недостатки: гистерезис напряжений и диссипация энергии на замкнутых упругих циклах (для логарифмической производной – при многоэтапном нагружении с разгрузкой, в [16] приведен соответствующий пример), а также – главное – отсутствие оснований для применения в определяющих соотношениях анизотропных материалов. Действительно, для упомянутых коротационных производных ПСК никак не связаны с симметричными свойствами (элементами) материала; с их использованием в основном моделируются изотропные материалы.

Представляется, что для общего случая анизотропного материала тензоры свойств (в том числе упругих), используемые при формулировке в актуальной конфигурации, должны быть постоянными в ПСК, связанной с материальными осями симметрии [12]. В этом случае для наблюдателя в фиксированной лабораторной системе координат эти тензоры будут изменяться как индифферентные, что позволяет выполнить принцип независимости определяющего соотношения от выбора системы отсчета. Вероятно, первым мысль о необходимости определения коротационных производных с привязкой к симметричным элементам материала (директорам) высказал J. Mandel², однако в его работах не удалось найти конкретное соотношение для описания спина решетки кристаллита.

Описываются другие известные подходы к формулировке определяющих соотношений в актуальной конфигурации для анизотропных материалов. В частности, в работах O.T. Bruhns, A. Vertram предлагаются способы формулировки определяющих соотношений анизотропных материалов в терминах актуальной конфигурации, основанные на преобразовании соотношений из отсчетной конфигурации. В работах Y.F. Dafalias и коллег, M.V. Rubin предлагаются способы построения соотношений с использованием жестких материальных триэдров осей симметрии для представительного макрообъема, в которых не вполне ясным является выделение этих триэдров, особенно – в общем случае изменения симметричных упругих свойств материала при формировании и изменении текстуры.

По п.3.1 сделаны следующие выводы: предпочтительна формулировка конститутивной модели в актуальной конфигурации в скоростях с использованием коротационных производных; нет обоснований для применения популярных коротационных производных для анизотропных материалов; существующие подходы к

² Mandel J. Equations constitutives et directeurs dans les milieux plastiques et viscoplastiques // Int. J. Solids Structures. – 1973. – Vol.9. – P.725–740.

формулировке скоростных соотношений в актуальной конфигурации не принимают во внимание изменение структуры материала, в частности, текстурирование поликристаллических металлов и сплавов.

Следует отметить, что для металлов и сплавов на мезомасштабном уровне возможно выделение элементов симметрии (осей, плоскостей). В связи с этим многоуровневые конститутивные модели на базе ФТП позволяют корректно описывать изменяющиеся симметричные свойства поликристаллов в процессах деформирования с большими градиентами перемещений.

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.

Предлагается новое представление движения среды на мезоуровне последовательностью пластических деформаций (с неизменным положением кристаллической решетки и связанной с ней ПСК), поворота ПСК вместе с материалом и упругого искажения решетки относительно ПСК [13]:

$$\overset{\circ}{\nabla} \mathbf{x}^T \equiv \mathbf{f} = \mathbf{f}^e \cdot \mathbf{f}^p = \bar{\mathbf{f}}^e \cdot \mathbf{r} \cdot \mathbf{f}^p, \quad (3.1)$$

где $\overset{\circ}{\nabla}$ – оператор Гамильтона, определенный в отсчетной конфигурации, \mathbf{x} – радиус-вектор материальных частиц, $\mathbf{f}^e, \mathbf{f}^p$ – упругая и пластическая составляющие градиента деформации, $\mathbf{r} = \mathbf{k}_i (\mathbf{k}^i|_{t=0}) \equiv \mathbf{k}_i \mathbf{k}_0^i$ – собственно ортогональный тензор, преобразующий отсчетный базис жесткой ПСК \mathbf{k}_0^i в текущий \mathbf{k}_i , $\bar{\mathbf{f}}^e$ – составляющая градиента деформации, характеризующая упругие искажения решетки. Представление (3.1) уточняет классическое разложение Кренера – Ли $\mathbf{f} = \mathbf{f}^e \cdot \mathbf{f}^p$ тем, что движение ПСК отделяется от упругих искажений решетки. Именно решетка осуществляет сопротивление внешним воздействиям, в связи с чем деформационное движение, с которым связываются напряжения в определяющем соотношении, определяется по $\bar{\mathbf{f}}^e$. При принятии (3.1) считается, что при пластическом деформировании ПСК неизменна, материал «течет» без изменения элементов материальной симметрии (и ПСК, связанной с ними); эта гипотеза фактически принимается во всех моделях ФТП – при скольжении краевых дислокаций не изменяются упругие свойства.

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), поэтому ПСК $Ox^1x^2x^3$ с ортонормированным базисом \mathbf{k}_i представляется обоснованным связать с кристаллографической системой координат $Oy^1y^2y^3$ [12]. Тензор спина ПСК на мезоуровне полностью определяется текущими ориентациями векторов базиса ПСК и упругой составляющей градиента скорости перемещений \mathbf{l}^e [12]. 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:

$$\begin{aligned}
\bar{\omega}_{Pl} = \dot{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{r}^T = \dot{\mathbf{k}}_i \mathbf{k}_i = & -(\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{l}^e \cdot \mathbf{k}_1) \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 - (\mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{l}^e \cdot \mathbf{k}_1) \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_3 + \\
& + (\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{l}^e \cdot \mathbf{k}_1) \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_1 - (\mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{l}^e \cdot \mathbf{k}_2) \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 + \\
& + (\mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{l}^e \cdot \mathbf{k}_1) \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_1 + (\mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{l}^e \cdot \mathbf{k}_2) \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_2.
\end{aligned} \tag{3.2}$$

Отметим, что напряжения Коши получаются близкими при любой привязке к кристаллографическим направлениям и плоскостям (результаты соответствующих численных расчетов приведены в главе 5). В общем случае при принятии (3.1) для определения спина (закона изменения γ) могут быть использованы другие физически обоснованные модели ротации (например, основанные на рассмотрении взаимодействия дефектов соседствующих кристаллитов [7], с учетом вклада от механизма зернограничного скольжения – глава 6 [19]).

При использовании (3.1) определяющие соотношения формулируются в «решеточной» разгруженной конфигурации \mathbf{K}_t^* , которая в каждый момент деформирования определяется аффинным преобразованием $\bar{\mathbf{f}}^{e-1}$ актуальной конфигурации \mathbf{K}_t однозначным образом – в силу осуществления ВДС с сохранением положения ПСК и однозначного определения γ (при разгрузке ПСК остается фиксированной, так как напряжения связываются с $\bar{\mathbf{f}}^e$, снятие нагрузки должно привести решетку в неискаженное положение, совпадающее с конфигурацией, полученной ортогональным преобразованием γ отсчетной конфигурации). В «решеточной» разгруженной конфигурации \mathbf{K}_t^* гиперупругое определяющее соотношение имеет вид [13]:

$$\bar{\boldsymbol{\kappa}} = \bar{\mathbf{p}}_{(cr)} : \bar{\mathbf{c}}^e, \tag{3.3}$$

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, $\bar{\boldsymbol{\kappa}} = \overset{\circ}{\rho} / \hat{\rho} \bar{\mathbf{f}}^{e-1} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \bar{\mathbf{f}}^{e-T}$ – второй тензор Пиола – Кирхгоффа, $\bar{\mathbf{p}}_{(cr)}$ – тензор упругих характеристик (компоненты постоянны в базисе ПСК).

От (3.3) легко перейти [10] к эквивалентной скоростной форме:

$$\bar{\boldsymbol{\kappa}}^{cr} = \bar{\mathbf{p}}_{(cr)} : \bar{\mathbf{c}}^{e^{cr}}, \tag{3.4}$$

где $\bar{\boldsymbol{\kappa}}^{cr}$, $\bar{\mathbf{c}}^{e^{cr}}$ – коротационные производные 2-го тензора напряжений Пиола–Кирхгоффа и упругой составляющей тензора деформаций Коши–Грина.

В силу эквивалентности (3.4) и (3.3), энергетической сопряженности используемых мер требования отсутствия гистерезиса напряжений и отсутствия диссипации энергии для определяющего соотношения (3.4) на произвольных замкнутых упругих циклах выполняются автоматически, что в п.3.2 проиллюстрировано примерами для различных случайно выбранных анизотропных (ГЦК и ГПУ) кристаллитов [13, 16]. На рис.3.1 приведены зависимости от времени компонент (в лабораторной системе координат) тензора напряжений Коши и изменения плотности внутренней энергии со временем для случайно выбранного кинематического упругого нагружения (параметры описаны в [13]). Полученные численные результаты подтверждают отсутствие гистерезиса напряжений и диссипации энергии при упругом циклическом деформировании.

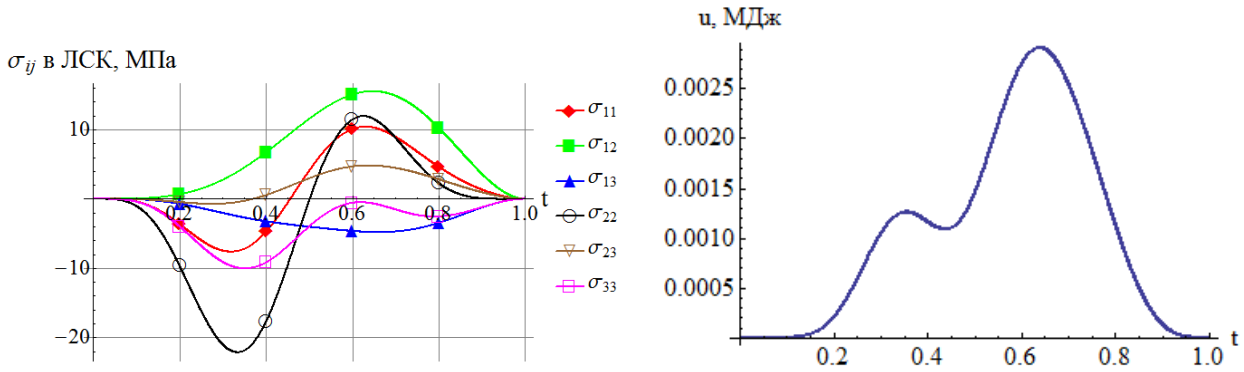


Рис. 3.1. Зависимость компонент тензора напряжений Коши в лабораторной системе координат (справа) и плотности внутренней энергии (слева) от времени для случайно ориентированного ГЦК-кристаллита

С учетом малости упругих искажений $\bar{\mathbf{f}}^e \approx \mathbf{I}$, характерных для металлов и сплавов, можно показать [14, 16], что определяющее соотношение (3.4) близко к соотношению (2.2) в терминах актуальной конфигурации (в изотермическом случае). Численными расчетами подтверждено, что использование «упрощенных» соотношений (2.2) приводит к незначительному отличию получаемых напряжений [14–16] (описание результатов расчетов приводится в главе 4). При описании технологических процессов интенсивного неупругого деформирования предпочтительно использовать соотношения в форме (2.2) – 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).

Отметим, что именно предложенная «строгая» формулировка (кинематические соотношения (3.1) и определяющие соотношения (3.4)) позволяет обоснованно осуществить переход к «приближенной» скоростной формулировке в актуальной конфигурации; предлагаемые кинематические и определяющие соотношения мезоуровня применимы при построении многоуровневых моделей различных типов.

В четвертой главе рассмотренные выше формулировки соотношений мезоуровня сопоставляются с известными моделями ФТП; приведены полная постановка задачи моделирования ПО 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.

В п.4.1 анализируются модели с различными упругими соотношениями: в предложенной «строгой» формулировке (3.5) в конечной форме (обозначена как «модель А»); в предложенной «строгой» формулировке (3.6) в скоростной форме (модель A_C); с линеаризованными соотношениями (с позиций наблюдателя в разгруженной с $\bar{\mathbf{f}}^{e-1}$ конфигурации, принимается близость этой конфигурации к актуальной) $J\boldsymbol{\sigma} = \bar{\mathbf{p}} : (\bar{\mathbf{f}}^e + (\bar{\mathbf{f}}^e)^T - 2\mathbf{I})/2$ (модель $A_{\text{лин}}$); с используемым в большинстве современных моделях ФТП законом в «классической» разгруженной конфигурации, получаемой из актуальной аффинным преобразованием $(\mathbf{f}^e)^{-1}$; $\boldsymbol{\kappa} = \mathbf{p}_0 : \mathbf{c}^e$

(модель Б); где $\hat{\kappa} = J(\mathbf{f}^e)^{-1} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{f}^e)^{-T}$ – второй тензор Пиола – Кирхгоффа, $\mathbf{c}^e = 1/2((\mathbf{f}^e)^T \cdot \mathbf{f}^e - \mathbf{I})$ – мера деформации Коши-Грина, $\bar{\mathbf{p}}_0$ – тензор упругих свойств; в предложенной приближенной формулировке (2.2) (модель В_c). Приводятся аналитические выкладки, показывающие строгую эквивалентность (в смысле одинакового отклика) формулировок А, А_c и Б [15], близость к ним формулировок В_c и А_{лин} при использовании одинакового спина и при справедливости предположения о постоянстве компонент тензора свойств в подвижной системе координат. Для иллюстрации в главе 5 (п.5.4) представлены результаты численных расчетов для различных нагружений.

Далее в п.4.1 рассматриваются различные спины: спин Тейлора (спин Т) $\bar{\boldsymbol{\omega}}_T = \frac{1}{2}((\hat{\nabla} \mathbf{v})^T - \hat{\nabla} \mathbf{v}) + \sum_{i=1}^K \frac{1}{2} \dot{\gamma}^i (\mathbf{n}^i \mathbf{b}^i - \mathbf{b}^i \mathbf{n}^i)$; спин модели «материального поворота» решетки (спин Re) $\bar{\boldsymbol{\omega}}_{Re} = \dot{\mathbf{R}}^e \cdot \mathbf{R}^{eT}$, где \mathbf{R}^e – ортогональный тензор из полярного разложения \mathbf{f}^e , $\mathbf{f} = \mathbf{f}^e \cdot \mathbf{f}^p$, $\mathbf{f}^e = \mathbf{R}^e \cdot \mathbf{U}^e = \mathbf{V}^e \cdot \mathbf{R}^e$; предложенный «решеточный» спин (3.2) при привязке к кристаллографическому направлению Oy^1 и плоскости Oy^1y^2 (спин P1); «решеточный спин» при привязке ПСК к Oy^2 и Oy^1y^2 (спин P2); «решеточный спин» при привязке ПСК к Oy^3 и Oy^1y^3 (спин P3). Приведены аналитические выкладки, подтверждающие, что определяемые в моделях А, А_c, Б напряжения Коши практически не зависят от способа привязки к элементам материальной симметрии [20], что все рассмотренные спины близки между собой в случае малых упругих искажений, характерных для металлов. Для иллюстрации в главе 5 (п.5.4) приведены результаты численных расчетов для различных нагружений с использованием различных спинов.

Резюмируя содержание п.4.1, можно заключить, что предложенные формулировки моделей мезоуровня дают близкие результаты к получаемым в известных моделях ФТП (не возникает существенных различий с опубликованными другими авторами результатами, подтвержденными экспериментальными данными), однако формулировка А с использованием разложения движения с явным выделением подвижной системы координат позволяет теоретически обоснованно перейти к близкой формулировке в скоростной форме в актуальной конфигурации В_c, которая является предпочтительной как для численного решения краевых задач с изменяющимися контактными условиями, так и для построения расширенных многоуровневых моделей с учетом дополнительных механизмов деформирования.

В п.4.2 приведена полная постановка задачи моделирования ПО макроуровня для предложенной формулировки конститутивной модели в скоростной форме в актуальной конфигурации, сформулирована постановка краевой задачи для описания технологических процессов с использованием многоуровневой конститутивной модели материала.

Глава 5 посвящена рассмотрению алгоритма численной реализации двухуровневой модели, описанию и анализу численных результатов моделирования неупругого деформирования представительных объемов материала, оценке чувствительности моделей к входным данным.

В п.5.1 представлены алгоритмы реализации двухуровневых моделей, основанных на численных методах интегрирования систем обыкновенных дифференциальных уравнений.

В п.5.2 приводится анализ результатов моделирования отдельных кристаллитов и поликристаллов при различных нагружениях, сопоставляются результаты, полученные при применении разных формулировок мезоуровня, рассмотренных в п.4.1 [15, 20].

На рис. 5.1 отображены зависимости компоненты $(-\Sigma_{33})$ тензора истинных напряжений Коши на макроуровне от компоненты $(-H_{33})$ логарифмической меры деформации при одноосном сжатии (в 5.1 приводится описание алгоритма реализации такого нагружения [7]) и зависимость компоненты $(-\Sigma_{23})$ тензора истинных напряжений Коши на макроуровне от величины сдвига при простом сдвиге медного образца [15]. ПО макроуровня представлялся выборкой из 343 кристаллитов, начальные ориентации которых распределены случайно по равномерному закону.

Используемые при расчете параметры были определены при идентификации на основе рассмотрения сжатия. Результаты изменения сдвиговых напряжений при простом сдвиге находятся в хорошем соответствии с экспериментальными данными.

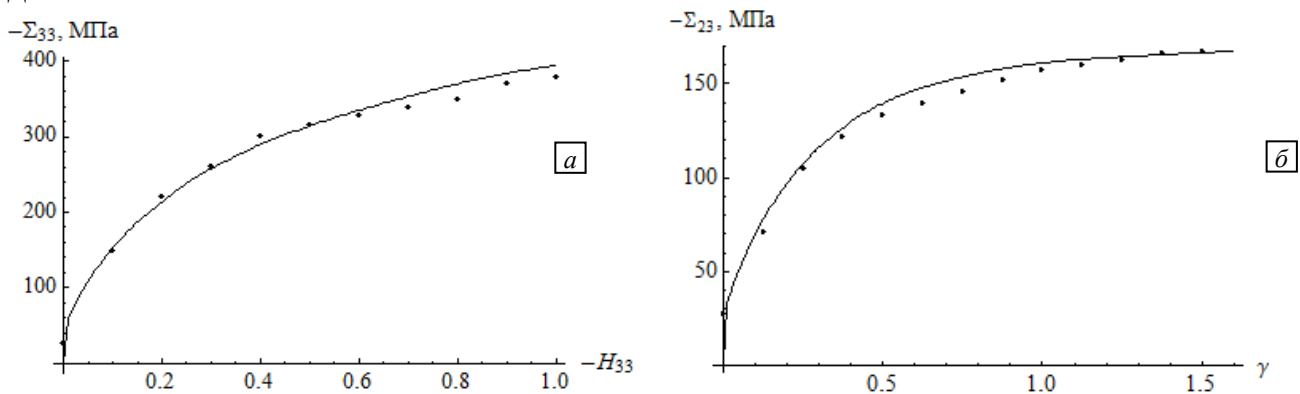


Рис. 5.1. Зависимости $(-\Sigma_{33})$ от H_{33} при одноосном сжатии (а) и $(-\Sigma_{23})$ от величины сдвига при простом сдвиге (б); точками показаны экспериментальные данные из [3], сплошной линией – результаты авторского моделирования

Для численной оценки отклонения результатов при использовании различных упругих законов введена норма:

$$\Delta_G = \max_t |\Sigma_G(t) - \Sigma_A(t)|, \quad (5.1)$$

где $|\mathbf{B}| = \sqrt{\mathbf{B}:\mathbf{B}^T}$, $\Sigma_G(t)$, $\Sigma_A(t)$ – макронапряжения, полученные при использовании модели G мезоуровня (одной из упомянутых выше) и модели A мезоуровня (во всех случаях использовался спин P1). В таблице 5.1 приведены результаты расчета отклонения макронапряжений при использовании разных моделей от макронапряжений, получаемых при использовании модели A (рассматриваемое сложное нагружение описано в [15], для других нагружений характерен тот же порядок отклонений; нулевые отклонения, указанные в таблице 5.1, означают отклонения не

³ 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.

выше порядка компьютерной погрешности при работе с действительными числами; $\Sigma_{u \max} = 343.62$ МПа – максимальная интенсивность макронапряжений при расчете с применением модели А мезоуровня со спином P1).

Таблица 5.1

Отклонение макронапряжений от получаемых при использовании модели А

Модель	А	А _{лин}	А _{скор}	Б	В _{скор}
Норма Δ_G (5.1), МПа	0	3.516	0	0	3.428
$\Delta_G / \Sigma_{u \max}$	0	0.996%	0	0	0.971%

Для численной оценки отклонения результатов при использовании различных упругих законов и спинов вводится норма:

$$\Delta_{G/\Omega} = \max_t |\Sigma_{G/\Omega}(t) - \Sigma_{A/P1}(t)|, \quad (5.2)$$

где $\Sigma_{G/\Omega}(t)$, $\Sigma_{A/P1}(t)$ – макронапряжения, полученные при использовании модели G мезоуровня со спином Ω (одного из вышеприведенных) и модели А со спином P1. В таблице 5.2 приведены результаты расчетов (5.2) при использовании разных моделей.

Таблица 5.2

Отклонение макронапряжений от получаемых при использовании модели А со спином P1

\ спин (Ω)	P1	P2	P3	T	Re
Отклонение $\Delta_{B_c/\Omega}$ (5.2), МПа	0	0.1274	0.1051	0.2127	0.2137
$\Delta_{A/\Omega} / \Sigma_{u \max}$	0	0.037%	0.031%	0.0619%	0.0622%
Отклонение $\Delta_{B_c/\Omega}$ (5.2), МПа	3.242	3.222	3.253	3.191	3.172
$\Delta_{B_c/\Omega} / \Sigma_{u \max}$	0.944%	0.937%	0.947%	0.929%	0.923%

Результаты в таблицах свидетельствуют о близости напряжений, получаемых при использовании различных формулировок, подтверждая корректность проведенных теоретических выкладок.

В п.5.3 описывается методика оценки чувствительности моделей к возмущениям входных данных [17] и результаты ее применения для двухуровневых моделей.

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 нагрузений (в общем случае это понятие можно расширить путем включения в него и других характеристик макроуровня, например, упругих и пластических свойств). Для определения величины отклонения введена соответствующая норма. Введено понятие чувствительности модели к возмущению параметра, определены соответствующие статистические характеристики.

Результаты свидетельствуют об устойчивости двухуровневой модели к возмущениям рассмотренных параметров (входных данных): их малые отклонения приводят к малым отклонениям отклика (при возмущении параметров в пределах 5% отклонение отклика не превышает 3,34% [17]). На основе выполненного анализа осуществлено ранжирование параметров рассмотренных моделей по степени чувствительности к их возмущению. Установлено, что совместное варьирование параметров оказывает более заметное влияние на отклик – в связи с существенной нелинейностью математической модели, при этом отклонение отклика от полученного при номинальных значениях параметров остается малым.

В **главе 6** описывается расширение двухуровневой модели – трехуровневая модель, учитывающая механизм зернограничного скольжения и позволяющая описывать деформирование в режиме структурной сверхпластичности. Последнюю можно охарактеризовать как способность материала деформироваться при определенных температурно-скоростных условиях с сохранением исходной зеренной структуры до аномально больших деформаций при аномально низких напряжениях течения. Рассматриваются температуры до 0.7 гомологической, поскольку при больших идет непрерывная динамическая рекристаллизация с постоянным перестроением зеренной структуры (при этом ее средние характеристики могут сохраняться), рассмотрение которой требует создания отдельной сложной модели.

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 (использовалась информация из работ Р.А.Васина, А.П.Гуляева, М.В.Грабского, О.А.Кайбышева, Р.З.Валиева, Р.Р.Мулюкова, В.Н.Чувильдеева, В.Н.Перевезенцева, М.М.Мышляева, А.А.Мазилкина, P.Berbon, J.W. Edington, X.Wang, M.Furukawa, H.Watanabe, R.S.Mishra и других ученых), предложен «сценарий», реализующийся во время одноосного испытания с переходом в режим структурной сверхпластичности [18].

На начальном этапе (восходящий участок кривой растяжения, приведенной на рис.6.1 для образца из алюминиевого сплава 1420) наблюдается упрочнение и преобладание механизма ВДС и ротаций зерен (образование текстуры), зернограничное скольжение (ЗГС) малозначимо. На переходной стадии (кривая растяжения постепенно изгибается) возрастает роль ЗГС, поскольку границы к этому моменту становятся более подготовленными к реализации ЗГС за счет притока решеточных дислокаций и выглаживания посредством зернограничной диффузии. В зависимости от исходной структуры материала и температурно-скоростных условий испытания либо на начальном этапе, либо на переходной стадии осуществляется динамическая рекристаллизация (рост низкодефектных зерен за счет поглощения высокодефектных), в ходе которой происходит снижение плотности дислокаций, рост среднего размера зерен и возвращение от вытянутой формы, полученной на первой стадии, к равноосной. Режим структурной сверхпластичности (финальная стадия на кривой с постепенным снижением напряжения течения) можно охарактеризовать доминированием ЗГС, сопровождаемого аккомодационными механизмами ВДС и зернограничной диффузии, ротациями и активной сменой соседних

зерен; имеет место стабильность структуры (размеры зерен остаются практически неизменными, структура – равноосной мелкозернистой).

Приведен обзор существующих моделей сверхпластичности, построенных в рамках различных подходов (макрофеноменологического – М.Х.Шоршоров, М.В.Грабский, И.И.Новиков, А.А.Пресняков, О.А.Кайбышев, Р.А.Васин, F.Li, D.H.Shin, O.D.Sherby, С.Н. Cáceres и многие др., структурно-механического – Р.А.Васин, Т.А.Белякова, О.И.Быля, О.М.Смирнов и др., термодинамического – О.Б.Наймарк, Л.С.Метлов, Я.И.Рудаев, А.И.Рудской, Д.А.Китаева, Г.М.Аманбаева и др., физические (с явным рассмотрением механизмов) – Д.Маклин, О.А.Кайбышев, Г.Глейтер, А.Н.Орлов, П.И.Полухин, В.Е. Панин, Р.З.Валиев, В.Н.Чувильдеев, А.И.Пшеничнюк, А.П.Жиляев и др.). Отмечено, что автору не встречались многоуровневые модели на основе ФТП, содержащие явное описание всех взаимодействующих механизмов при пластическом и сверхпластическом деформировании.

Между тем, поскольку в разных частях изделия могут наблюдаться существенно различные истории воздействий, построение такой модели актуально, поскольку позволит в рамках единой модели описывать различные режимы деформирования и переходы между ними. Ее использование представляется существенно более корректным по сравнению с применением различных моделей для разных частей изделия (в частности, в этом случае не вполне ясно, на основе каких «переключателей» осуществлять переход от одной модели к другой и как переопределять свойства при этом переходе). Стоит заметить, что для описания СП-испытаний с классическими моделями вида $\sigma = K\varepsilon^n \dot{\varepsilon}^m$ необходимо определять параметры соотношения как материальные функции⁴ (зависящими от скорости деформации и от накопленной деформации).

В п.6.2 содержится описание соотношений предложенной трехуровневой модели. Модель сформулирована на основе двухуровневой модели в скоростной форме в актуальной конфигурации, приведенной в главе 2. Стоит отметить, что важнейшей задачей являлась разработка общей структуры модели, включающей все значимые физические механизмы деформирования и учитывающей их взаимодействия, в рамках этой структуры конкретные соотношения могут быть модифицированы на основе привлечения более подробной информации из физики твердого тела и экспериментальных данных (в том числе для процессов нагружения, отличных от одноосного).

Ключевым обстоятельством, обуславливающим потребность в модификации двухуровневой модели, является необходимость учета лидирующего при СП-деформировании механизма ЗГС. Для этого в модель вводится дополнительный структурный уровень, на котором рассматриваются границы кристаллитов и (возможные) смещения по ним [11]. Принимается, что межкристаллитная граница представляет собой фасетку с нулевой толщиной, каждая пара соседних кристаллитов в представительном макрообъеме имеет общую фасетку границы, относительные смещения кристаллитов происходят по общей фасетке (путем перемещения в них зернограничных дислокаций, однако без явного введения в модель носителей данного механизма). При построении конститутивной модели осуществ-

⁴ Васин Р.А., Еникеев Ф.У. Введение в механику сверхпластичности: В 2-х ч. Ч.1. – Уфа: Гилем, 1998. – 280 с.

ляется переход от смещений к деформационным характеристикам: скорость смещения аппроксимируется скоростью сдвига, осредненной на представительный макрообъем (по аналогии с установлением соотношения для скорости сдвига в кристаллите за счет внутризеренного дислокационного скольжения с использованием уравнения Орована [19, 25]). Неупругая составляющая \mathbf{Z}_{gb}^{in} меры скорости

деформации за счет ЗГС определена как $\mathbf{Z}_{gb}^{in} = \sum_{i=1}^{4K_{gb}} \dot{\gamma}_{gb}^{(i)} \mathbf{b}_{gb}^{(i)} \mathbf{n}_{gb}^{(i)}$, где $\mathbf{n}_{gb}^{(i)}$ – нормаль к плоскости фасетки границы, $\mathbf{b}_{gb}^{(1)}$ и $\mathbf{b}_{gb}^{(2)}$ – взаимно ортогональные единичные векторы направлений смещения в плоскости фасетки (в начальный момент времени один из векторов направления смещения привязывается к решетке одного из кристаллитов), $4K_{gb}$ – общее количество базисных направлений смещения по всем фасеткам границ в представительном объеме макроуровня.

С учетом деформирования за счет ЗГС определяющее соотношение макроуровня модифицируется к виду [19]:

$$\mathbf{K}^{cor} = \bar{\mathbf{P}} : (\hat{\mathbf{V}}\mathbf{V}^T - \bar{\mathbf{\Omega}} - \mathbf{Z}_{gb}^{in} - \mathbf{Z}_s^{in} - \mathbf{Z}^{th}). \quad (6.1)$$

В отличие от соотношений (2.1) здесь учтено, что в неупругую деформацию вносит вклад зернограничное скольжение – составляющая \mathbf{Z}_{gb}^{in} . Кинематические воздействия на мезоуровне определяются через кинематические воздействия с макроуровня с учетом реализации части воздействий за счет механизма зернограничного скольжения $\hat{\mathbf{V}}\mathbf{V}^T = \hat{\mathbf{V}}\mathbf{V}^T - \mathbf{Z}_{gb}^{in}$ (кроме того, в подмодель мезоуровня внесены описанные ниже изменения, отражающие учет взаимодействия механизмов внутризеренного и зернограничного скольжения, возможного влияния последнего на ротацию кристаллитов).

Соотношение для определения скоростей зернограничных сдвигов $\dot{\gamma}_{gb}^{(i)}$ принято в виде [19]:

$$\dot{\gamma}_{gb}^{(i)} = \dot{\gamma}_{gb0}^{(i)} \left(\tau_{gb}^{(i)} / \tau_{cgb}^{(i)} \right)^n H(\tau_{gb}^{(i)} - \tau_{cgb}^{(i)}), \quad i = 1, \dots, 4K_{gb}, \quad (6.2)$$

где $\dot{\gamma}_{gb0}^{(i)}$ – параметр модели, зависящий от площади рассматриваемой границы, интенсивности скорости деформации и размера зерна, $\tau_{gb}^{(i)}$ и $\tau_{cgb}^{(i)}$ – касательные и критические сдвиговые напряжения, H – функция Хевисайда, n – параметр модели.

В модели явно описывается имеющая место смена соседних кристаллитов, поэтому касательные напряжения $\tau_{gb}^{(i)}$ для границы определяются осреднением напряжений мезоуровня в составляющих границу зернах (как исходно составляющих границу, так и сменяющих их) с учетом величины осуществленного к текущему моменту сдвига и характерного для данной границы предельного значения сдвига перед полной потерей контакта исходно составлявших границу зерен [19].

В эволюционных уравнениях для критических напряжений ЗГС $\tau_{cgb}^{(i)}$ учтены значимые факторы [19, 21–24], определенные при физическом анализе опубликованных экспериментальных данных [18]:

– сопротивление сдвигу со стороны соседних зерен с учетом влияния процесса динамической рекристаллизации (выход растворенных частиц на границы кристаллита; средний размер зерен увеличивается; форма на начальной стадии испытания вытягивается, после чего вновь становится близкой к равноосной),

– понижение критических напряжений ЗГС за счет механического выглаживания, которое происходит при контактном взаимодействии зерен при реализации сдвига, а также за счет уменьшения шероховатости от сдвигов на микроуровне,

– повышение энергии границ в результате притока решеточных дислокаций,

– понижение критических напряжений ЗГС в результате сглаживания границ за счет диффузионных процессов, облегчения процессов диссоциации накопленных в границе дислокаций ориентационного несоответствия на зернограницные дислокации, переползания дислокаций. В ряде работ (В.Н.Чувильдеева, Н.В.Сахарова и других) отмечается «ускорение зернограницной диффузии при сверхпластичности», коэффициент зернограницной диффузии связывается с притоком внутривитеренных дислокаций в границу: с увеличением скорости деформации возрастает интенсивность притока дислокаций в границу, что делает ее более неравновесной (более дефектной) и способной к зернограницному скольжению. В рамках предлагаемой модели осуществляется отдельный учет зернограницной диффузии и притока решеточных дислокаций в границу. При смене соседних кристаллитов критические напряжения ЗГС переопределяются с учетом частичного наследования накопленных изменений [19].

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).

Трехуровневая модель апробирована на описании испытаний образцов промышленного алюминиевого сплава 1420 с выходом в режим структурной сверхпластичности, информация об изменении зеренной структуры в процессе которых известна и была заложена в модель напрямую. В дальнейшем в структуру общей модели будет встроена разрабатываемая в коллективе, в который входит автор, подмодель для описания динамической рекристаллизации, упомянутая эмпирическая информация будет заменена на результаты, получаемые в общей модели при применении к исследованию конкретных условий деформирования.

В качестве параметров модели принимаются значения продольной компоненты тензора деформации Генки H_0 , H_F начала и завершения процесса рекристаллизации. Задается линейный рост объема зерна от начального размера при H_0 до конечного значения при H_F , аналогичным образом задается рост доли рекристаллизованной фазы от начального значения до 1. Отметим, что принятые линейные приближения несущественно отличаются от результатов определения изменения доли рекристаллизованной фазы, получаемых в классических макрофеноменологических моделях рекристаллизации типа Авраами – Джонсона – Мела – Колмогорова. Прямое моделирование (с рассмотрением реальной топологии плотноупакованных зерен) рекристаллизации, как и ЗГС, сопряжено со значительными трудностями. Например, трудноразрешимой задачей является переопределение топологии при поглощении нерекристаллизованного зерна рекристаллизованными –

строго говоря, необходимо определять характеристики вновь образованных границ, что требует разработки и применения весьма сложной модели рекристаллизации. В связи с этим предлагается приближенное описание процесса рекристаллизации, использующее статистический характер предлагаемой конститутивной модели. Под элементом мезоуровня в контексте приведенного выше описания конститутивной модели в расширенной трехуровневой модели понимается «эффективное» зерно (можно сказать, что в модель вводится своеобразный структурный уровень), агрегирующее свойства рекристаллизованного и нерекристаллизованного зерна (используется свойство статистичности модели). Все характеристики «эффективного» зерна определяются как линейная комбинация характеристик составляющих с учетом текущей доли рекристаллизованной фазы (после окончания процесса рекристаллизации характеристики эффективного зерна полностью совпадают с характеристиками заполнившего его объем рекристаллизованного зерна). В модели уровня описания ЗГС используются характеристики эффективного зерна. Соотношения мезоуровня применяются отдельно для каждой составной части зерна (и для рекристаллизованной, и для нерекристаллизованной). По текущему размеру зерна и доле фазы определяется условный размер каждой составной части зерна, которые используются при определении зернограницного упрочнения составляющего зерна.

Для каждой составляющей «эффективного зерна» принимается эволюционное соотношение для критических напряжений внутризеренных сдвигов в виде [19]:

$$\dot{\tau}_c^{(k)} = \dot{\tau}_{st}^{(k)} + \dot{\tau}_b^{(k)}, \quad (6.3)$$

предполагая, что критические напряжения могут изменяться как за счет барьеров дислокационной природы внутри зерна $\dot{\tau}_{st}^{(k)}$, так и за счет влияния границ кристаллитов $\dot{\tau}_b^{(k)}$. Для исходно рекристаллизованных зерен первой составляющей можно пренебречь, поскольку плотность дефектов в них мала и при внутризеренном дислокационном скольжении практически не возникают дополнительные препятствия. Для нерекристаллизованных зерен используется базовый закон упрочнения (2.4) для $\dot{\tau}_{st}^{(k)}$ с учетом влияния скорости деформации на темп упрочнения [19]: $h_0 = h_{fixD} (D_0 / D_{0fix})^\psi$, h_{fixD} – значение параметра, определяемое при идентификации модели при некоторой фиксированной начальной скорости деформации D_{0fix} , D_0 – начальная скорость деформации в испытаниях с постоянной скоростью движения захватов, ψ – дополнительный параметр модели (определяется из сопоставления максимальных напряжений в испытаниях при двух скоростях деформации), а также с добавлением разупрочняющего слагаемого аррениусовского типа $\left(-A \left(\exp[\tau_c^{(k)} / \bar{\tau}] - 1 \right) \exp(-U / k\theta) \right)$, описывающего влияние диффузионных процессов на сопротивление ВДС – при увеличении температуры и уменьшении скорости деформации повышается как вероятность преодоления барьеров движущимися дислокациями, так и вероятность распада барьеров (θ – температура, k – постоянная Больцмана, A , U , $\bar{\tau}$ – параметры модели).

Для описания зернограничного упрочнения $\dot{\tau}_b^{(k)}$ используется подход, описанный в ⁵: учитывается взаимная разориентация соседних зерен, размер зерна и скорость сдвигов за счет ВДС, однако с модификацией [19] – при активации ЗГС часть образующихся дислокаций ориентационного несоответствия диссоциирует в зернограничные дислокации, что может, в зависимости от соотношения скоростей ВДС и ЗГС, приводить как к ослаблению зернограничного упрочнения, так и к разупрочнению.

При активизации зернограничного скольжения по нескольким границам зерна появляется возможность его дополнительного поворота за счет действия сдвиговых напряжений по границам; для описания последнего к спину добавляется составляющая $\bar{\omega}_{gb} = \dot{\gamma}_{gb0} b \mu_\tau H \left(\left\| \left\langle \mathbf{z}_{gb}^{\text{in}} \right\rangle_{\text{grain}} \right\| \right)$, где b – параметр модели (характеризует податливость по отношению к моментным воздействиям), μ_τ – момент за счет действия касательных усилий на всех границах зерна, функция Хевисайда $H(\cdot)$ выступает в роли индикаторной для дополнительного вращения зерна за счет сдвиговых напряжений по границам.

Описывается процедура идентификации параметров модели. Принималось условное разделение всех параметров на два вида: параметры состояния и параметры управления. К первому виду относятся ряд материальных или физических параметров (всего – 13), значения которых считаются известными – или заданными, или найденными в рамках других (преимущественно – экспериментальных) исследований, или установленными при помощи простых процедур (например, за счет привлечения известных соображений из ФТТ). Для установления параметров второго вида (параметров управления, всего их 17) используется процедура идентификации с решением задачи оптимизации для приближения к данным экспериментов.

Важно отметить, что значительные возможности для идентификации модели предоставляет предварительный физический анализ процессов СПД и разработанный на его основе сценарий деформирования, приведенный в п.6.1 – полученные результаты расчетов должны согласовываться с предложенным сценарием. Данное условие можно формально включить в оптимизационную задачу добавлением штрафных функций, имеющих большие значения в случае невыполнения какого-либо требования по соответствию сценарию при идентификации. Во избежание усложнения численной процедуры на практике рассматривались различные диапазоны значений параметров, определенные в результате предварительной оценки – таким образом, чтобы все соотношения модели были значимыми. После установления диапазонов параметров для конкретизации их значений применялась процедура приближения к экспериментальной кривой при сохранении требования соответствия сценарию – путем численного решения оптимизационной задачи с использованием метода прямого поиска Нелдера – Мида.

Завершающим этапом процедуры идентификации являлось определение параметра скоростной чувствительности ψ – для этого использовались эксперимен-

⁵ 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.

тальные данные только о максимальных напряжениях при растяжении с другой начальной скоростью деформирования (т.е. из опытных данных для этого эксперимента использовалась только одна точка на кривой).

На рис.6.1 представлены экспериментальные и полученные с помощью предлагаемой модели кривые одноосного растяжения образцов из алюминиевого сплава 1420. Для определения материальных параметров и проверки модели рассмотрены эксперименты при двух различных скоростях деформирования: кривая, полученная при скорости деформирования 10^{-3} c^{-1} , использовалась для идентификации модели, при 10^{-2} c^{-1} – для верификации (максимальное напряжение использовалось при идентификации параметра p). Результаты, приведенные на рис.6.2, свидетельствуют об увеличении роли зернограничного скольжения.

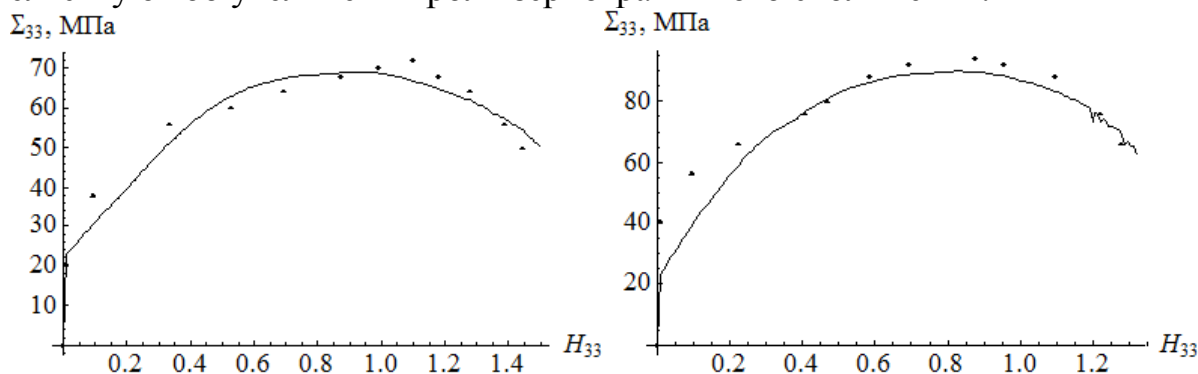


Рис.6.1. Зависимости интенсивности напряжений $\Sigma_u = \Sigma_{33}$ от H_{33} , полученные при моделировании и в натуральных (обозначены точками) испытаниях на растяжение образцов из сплава 1420 (Al-5.5%Mg-2.2%Li-0.12%Zr) при гомологической температуре 0.56:

слева – при начальной скорости деформации $D_0 = 10^{-3} \text{ c}^{-1}$, справа – при $D_0 = 10^{-2} \text{ c}^{-1}$

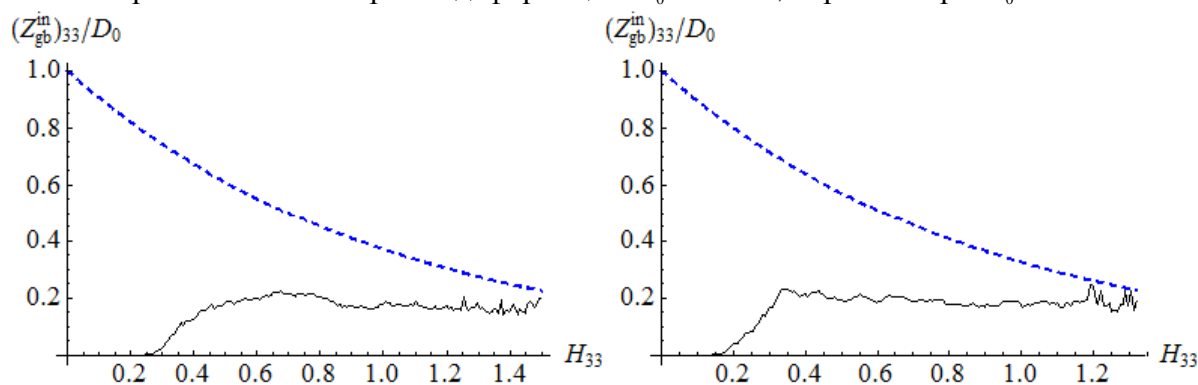


Рис.6.2. Значения компонент скорости неупругой деформации за счет зернограничного скольжения $(Z_{gb}^{in})_{33}$, выведенные через равные промежутки деформации H_{33} :

слева – при начальной скорости деформации $D_0 = 10^{-3} \text{ c}^{-1}$, справа – при $D_0 = 10^{-2} \text{ c}^{-1}$ (штрихованной линией обозначена падающая скорость полной деформации D_{33})

Построенные полюсные фигуры на рис.6.3 подтверждают доминирование внутриверного дислокационного скольжения на первой стадии (приводящего к формированию текстуры, близкой к текстуре растяжения), на завершающей стадии при лидирующем зернограничном скольжении происходит «размывание» текстуры.

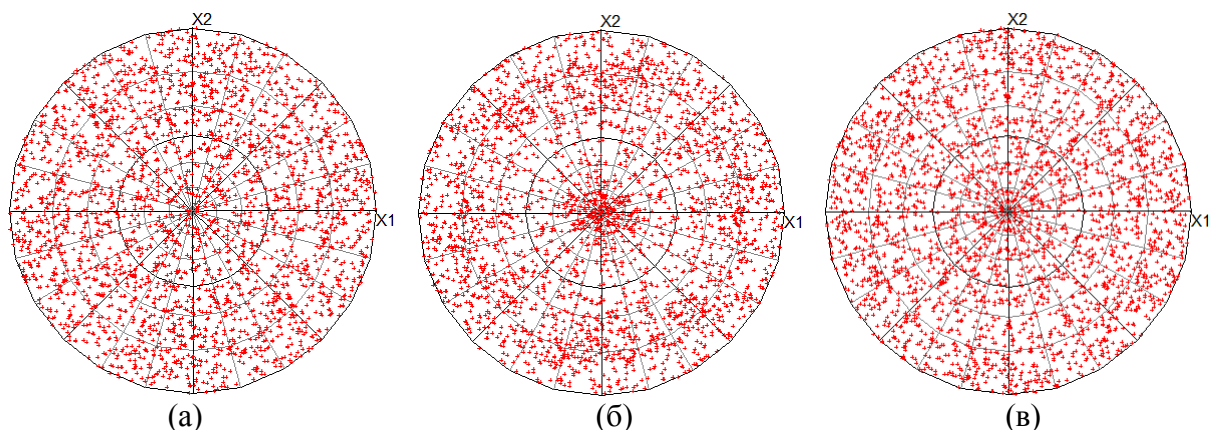


Рис. 6.3. Прямые полюсные фигуры для направлений $\langle 111 \rangle$ (проецирование с оси OX_3), полученные при $D_0 = 10^{-2} \text{ с}^{-1}$: а) в начальный момент времени для всех нагружений, б) после растяжения до $H_{33}=0.9$, в) после растяжения до $H_{33}=1.3$

Представлены результаты моделирования для других видов нагружения (простого сдвига, сложного нагружения) для образцов из сплава 1420, показано, что они согласуются с физическими соображениями.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

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 конкретизированы задачи работы, результаты решения которых представлены в следующих пунктах.

2. Осуществлена формулировка новой 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.

3. Разработан новый подход к формулировке геометрически и физически нелинейных кинематических и определяющих соотношений многоуровневых конститутивных моделей с учетом симметричных свойств элементов мезоуровня. Предложено новое представление движения среды на мезоуровне с выделением поворота подвижной системы координат, сформулированы определяющие соотношения в «решеточной» разгруженной конфигурации, для которых выполняются требования отсутствия гистерезиса напряжений и отсутствия диссипации энергии на произвольных замкнутых упругих циклах. Предложенная формулировка позволяет обоснованно осуществить переход к скоростной формулировке в актуальной конфигурации.

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 нагрузений 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 полученным с использованием разработанных моделей, однако использование предложенного подхода позволяет осуществить физически обоснованную постановку в актуальной конфигурации, предпочтительную для решения краевых задач с изменяющимися контактными граничными условиями и развития моделей в случае расширения диапазона воздействий (увеличения числа учитываемых механизмов).

5. Разработана новая методика исследования чувствительности многоуровневых моделей к входным данным (воздействиям, параметрам, начальным условиям). Результаты применения методики свидетельствуют об устойчивости предложенных моделей к возмущениям рассмотренных параметров: их малые отклонения приводят к малым отклонениям отклика.

6. Двухуровневая 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 (ВДС, ротации решеток кристаллитов, ЗГС, 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 изменяющейся структуры матери-

ала, определяемых ее состоянием эффективных физико-механических свойств и механизмов деформирования на различных масштабных уровнях и их взаимодействиях, с помощью созданных моделей исследованы закономерности процессов упругопластического, упруговязкопластического и сверхпластического деформирования.

ОСНОВНЫЕ ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. 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. (ВАК) (переводная – *Physical Mesomechanics*. – 2010. – Vol.13 (1-2) (*Web of Science, Scopus*))
2. 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. (ВАК)
3. 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. (ВАК) (*Physical Mesomechanics*. – 2011. – Vol. 14 (1-2) (*WoS, Scopus*))
4. 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. (ВАК)
5. Трусов П.В., Швейкин А.И. Многоуровневые физические модели моно- и поликристаллов. Статистические модели // Физическая мезомеханика. – 2011. – Т. 14, №4. – С. 17–28. (ВАК) (*Physical Mesomechanics*. – 2013. – Vol.16, No.1 (*WoS, Scopus*))
6. Трусов П.В., Швейкин А.И. Многоуровневые физические модели моно- и поликристаллов. Прямые модели // Физическая мезомеханика. – 2011. – Т. 14, №5. – С. 5–30. (ВАК) (*Physical Mesomechanics*. – 2013. – Vol.16, No.2 (*WoS, Scopus*))
7. 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. (ВАК) (*Physical Mesomechanics*. – 2012. – Vol.15 (3-4) (*WoS, Scopus*))
8. 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. (ВАК)
9. 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. (*WoS, Scopus*)
10. Трусов П.В., Кондратьев Н.С., Швейкин А.И. О геометрически нелинейных определяющих соотношениях упругого материала // Вестник ПНИПУ. Механика. – 2015. – № 3. – С.182-201. (*Scopus*)
11. 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(4). – Pp. 281-298. (**WoS, Scopus**)
12. 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. (**ВАК**) (*Physical Mesomechanics. – 2017. – Vol. 20, No.4 (WoS, Scopus)*)
 13. 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. (**ВАК**) (*Physical Mesomechanics. – 2017. – Vol. 20, No.4 (WoS, Scopus)*)
 14. 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. (**ВАК**) (*Physical Mesomechanics. – 2018. – Vol.21, No.3 (WoS, Scopus)*)
 15. Швейкин А.И. Многоуровневые модели поликристаллических металлов: сопоставление определяющих соотношений для кристаллитов // Проблемы прочности и пластичности. – 2017. – Т.79, №4. – С.385–397. (**ВАК**)
 16. 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(2). – Pp. 133–166. (**WoS, Scopus**)
 17. 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. (**ВАК**)
 18. Шарифуллина Э.Р., Швейкин А.И., Трусов 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. (**ВАК, Scopus**)
 19. Трусов П.В., Шарифуллина Э.Р., Швейкин А.И. Многоуровневая модель для описания пластического и сверхпластического деформирования поликристаллических материалов // Физическая мезомеханика. – 2019. – Т.22, №2. – С.5–23. (**ВАК**) (*Physical Mesomechanics. – 2019. – Vol.22, No.5. (WoS, Scopus)*)
 20. 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(1). – Pp.1–20. (**WoS, Scopus**)
 21. 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. (**Scopus**)
 22. Trusov P., Sharifullina E., Shveykin A. Three-level modeling of fcc polycrystalline inelastic deformation: grain boundary sliding description // IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering. – 2015. – Vol.71. – 012081. (**Scopus**)

23. 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. (*Scopus*)
24. 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. (*WoS, Scopus*)
25. 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.
26. Шарифуллина Э.Р., Трусов 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.
27. Шарифуллина Э.Р., Швейкин А.И., Трусов 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.