

На правах рукописи

Грибов Дмитрий Сергеевич

Физически-ориентированная трёхуровневая модель для исследования
неупругого деформирования поликристаллов: описание сложного
циклического нагружения материалов с различной энергией дефекта
упаковки

Специальность:

05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

Пермь 2022

Работа выполнена на кафедре математического моделирования систем и процессов Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Пермский национальный исследовательский политехнический университет»

Научный руководитель	Трусов Петр Валентинович, доктор физико-математических наук, профессор
Официальные оппоненты	Вахрушев Александр Васильевич, д-р физ.-мат. наук, профессор, главный научный сотрудник отдела моделирования и синтеза Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Удмуртский федеральный исследовательский центр Уральского отделения Российской академии наук», г. Ижевск Волков Александр Евгеньевич, д-р физ.-мат. наук, профессор, профессор кафедры теории упругости Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет», г. Санкт-Петербург
Ведущая организация	Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт машиноведения имени Э.С. Горкунова Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург

Защита состоится « **ДД** » **декабря** 2022 г. в **ЧЧ:ММ** часов на заседании диссертационного совета Д ПНИПУ.01.19 в Федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Пермский национальный исследовательский политехнический университет» по адресу: 614990, Пермский край, г. Пермь, Комсомольский проспект, д. 29, тел: (342) 237-84-61; факс: (342) 237-84-87.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте ФГАОУ Пермский национальный исследовательский политехнический университет: www.pstu.ru.

Автореферат разослан « » _____ 2022 г.

Ученый секретарь диссертационного совета,

к.ф.-м.н., доцент

Е.Л.Кротова

Общая характеристика работы

Актуальность темы. Разработка новых и совершенствование существующих технологий термомеханической обработки металлов и сплавов в настоящее время невозможны без применения математических моделей (ММ). Особую роль при построении последних играют определяющие соотношения (ОС) (или конститутивные модели (КМ)), описывающие свойства конкретных материалов. Известно, что физико-механические свойства сплавов и рабочие характеристики изделий из них определяются главным образом мезо- и микроструктурой материалов. В последние десятилетия активно развиваются и применяются модели, позволяющие явным образом описывать изменение структуры материалов. В процессах обработки, в большинстве случаев осуществляемых методами неупругого деформирования, материалы испытывают сложное нагружение. Отдельный интерес представляет описание сложного циклического нагружения материалов с низкой энергией дефекта упаковки (ЭДУ), сопровождаемого существенным ростом предела текучести – дополнительным циклическим упрочнением (ДЦУ). Использование таких нагружений на финишных операциях изготовления деталей (обкатка роликами, обдувка дробью, рихтовка арматурной проволоки и т.д.) позволяют значительно повысить рабочие характеристики изделий.

В настоящее время существует большое число работ, включающих результаты экспериментальных исследований с анализом микроструктуры и макрофеноменологические ОС для описания сложного циклического деформирования; значительных успехов в данной области достигли многие исследователи (А. Benallal, V. Doquet, H.S. Lamba, K.C Valanis, С. Beradai, С. Laird, J.P. Dingli, P. Li, Y. Jiang, Y. Ohashi, E. Krempl, T. Itoh и др.). Известные данные экспериментов указывают на нетипичный отклик материалов с низкой ЭДУ на сложное циклическое деформирование – существенное (десятки процентов) ДЦУ, не наблюдаемое для исследуемых материалов при простых (пропорциональных) циклических нагружениях. Исследователи связывают данный факт с большим числом активируемых систем скольжения и взаимодействием дислокаций пересекающихся систем скольжения, что приводит к образованию развитой системы внутризёренных дефектов. Следует отметить, что в данном классе ОС структура материалов в явном виде не рассматривается. При этом макрофеноменологические ОС устанавливают связи между макропараметрами, что с учетом свойства памяти деформируемых твердых тел приводит к необходимости их формулировки в виде сложных тензорзначных операторов, для идентификации параметров которых требуется проведение большого числа

дорогостоящих экспериментов на сложное деформирование (в том числе – циклическое) на образцах из каждого исследуемого материала.

Как отмечено выше, в настоящее время активно развивается подход, использующий явное описание физических механизмов неупругого деформирования и их носителей (дефектов различных структурно-масштабных уровней), обуславливающих изменения свойств материалов. Такие модели в большинстве случаев включают в себя подмодели нескольких структурно-масштабных уровней и позволяют с различной степенью детализации (в зависимости от поставленной задачи и используемого аппарата) описать эволюцию материала. Значительных успехов в построении данного класса КМ достигли многие исследователи (Р.Р. Балохонов, А.В.Вахрушев, А.Е.Волков, А.М.Кривцов, В.А. Лихачёв, В.Е. Панин, В.А.Романова, П.В.Трусков, А.И. Швейкин, D.L. McDowell, J. Bishop, T.G. Lin, F. Roters, M. Knezevic, B. Devincere, A. Ma и др.). Модели данного класса основаны на введении внутренних переменных (ВП), подразделяемых на явные и неявные; явные непосредственно входят в структуру собственно ОС данного уровня; к неявным относятся переменные, описывающие структуру на более глубоких структурно-масштабных уровнях и входящие в качестве переменных в эволюционные уравнения данного уровня. К преимуществам таких моделей можно отнести их значительную универсальность, применимость для широких классов материалов и воздействий. При этом данные КМ позволяют учитывать особенности физических механизмов неупругого деформирования, к числу которых относятся различия в характере эволюции дислокационных субструктур в материалах с различной энергией дефекта упаковки (ЭДУ). Следует отметить, что в существующих моделях подобным особенностям не уделено должного внимания. Учитывая теоретическую и практическую важность исследования процессов сложного нагружения (в том числе – циклического), выбранную тему исследования можно считать **актуальной**.

Цель работы. Целью работы является модификация двухуровневой модели, основанной на физической теории упруговязкопластичности, введением дополнительного структурного уровня для описания эволюции дефектной субструктуры при исследовании упругопластического деформирования поликристаллических металлов и сплавов при произвольных (в том числе – сложных циклических) нагружениях. Разрабатываемая модель базируется на явном описании дефектов кристаллической решётки и механизмов их эволюции: генерации и взаимодействия (включая аннигиляцию) дислокаций, формирования барьеров на расщеплённых дислокациях.

Задачи:

- анализ основных физических механизмов и их носителей, выделение наиболее важных с точки зрения описания эффектов сложного нагружения механизмов и характеристик материалов;
- разработка трёхуровневой конститутивной модели для анализа неупругого деформирования материалов при термомеханических воздействиях, основанной на явном описании эволюции плотностей дефектов на системах скольжения;
- формулировка законов упрочнения на основе рассмотрения взаимодействия дислокаций и барьеров на СС;
- идентификация и верификация модели, включающая проведение численных экспериментов для различных процессов деформирования материалов с различными величинами ЭДУ;
- проведение численных экспериментов, анализ влияния различных механизмов на эволюцию плотностей дефектов разного типа и изменение физико-механических свойств материалов.

Научная новизна заключается в:

- модификации двухуровневой конститутивной модели за счет введения дополнительного уровня для описания эволюции плотностей дефектов;
- построении замкнутой системы эволюционных уравнений для описания изменения плотностей дефектов;
- введении в модель явного описания реакций по образованию барьеров Ломера – Коттрелла и Хирта на расщеплённых дислокациях;
- формулировке закона упрочнения, включающего учёт взаимодействия дислокаций с барьерами различной природы;
- получении с использованием разработанной модели новых результатов, позволяющих объяснить физическую природу явления дополнительного циклического упрочнения в материалах с низкой ЭДУ.

На защиту выносятся:

- трёхуровневая упруговязкопластическая модель, ориентированная на явное описание эволюции плотностей дефектов;
- закон упрочнения, позволяющий учесть формирование и разрушение барьеров на расщеплённых дислокациях;
- алгоритм реализации трёхуровневой модели, процедуры и результаты идентификации и верификации;
- результаты численного моделирования материалов с различной ЭДУ по сложным циклическим траекториям.

Практическая значимость работы:

- модель и программа ее реализации могут быть применены при описании отклика поликристаллических материалов с различной величиной ЭДУ в условиях сложного деформирования (свидетельство о государственной регистрации программ для ЭВМ № 2020665918);
- модель позволяет анализировать текущее состояние дефектной микроструктуры (плотности дислокаций по системам скольжения, плотности барьеров Ломера–Коттрелла и Хирта, плотности источников дислокаций) при исследовании процессов обработки металлов и сплавов.

Достоверность подтверждена удовлетворительным соответствием данных натуральных экспериментов и результатов, полученных в численных экспериментах на сложное циклическое деформирование материалов с разной величиной ЭДУ с использованием разработанной модели.

Апробация работы. Основные результаты, представленные в диссертационной работе, докладывались и обсуждались на XXIV – XXIX Всероссийских школах-конференциях молодых ученых «Математическое моделирование в естественных науках» (Пермь, 2015-2020 гг.), XX – XXII Зимних школах по механике сплошных сред (Пермь, 2017-2021 гг.), Международных конференциях: «Механика, ресурс и диагностика материалов и конструкций» (Екатеринбург, 2021, 2022), Физическая мезомеханика материалов (Томск, 2019-2021). Работа полностью представлена и обсуждена на семинарах Института механики сплошных сред УрО РАН (рук. академик РАН В.П. Матвеевко), кафедры математического моделирования систем и процессов ПНИПУ (рук. проф. П.В. Трусов), кафедры механики композиционных материалов и конструкций ПНИПУ (рук. проф. А.Н.Аношкин).

Личный вклад автора: постановка задачи (совместно с научным руководителем), формулировка определяющих и эволюционных уравнений модели, разработка и реализация программ на ЭВМ, проведение вычислений, анализ результатов.

Публикации. Основные результаты исследований по теме диссертации представлены в 6 научных статьях [1-6], опубликованных в изданиях, рекомендованных ВАК и входящих в базы цитирования Web of Science и/или Scopus.

Краткое содержание работы

Во **введении** обосновывается актуальность и научная новизна диссертационного исследования, обсуждаются возможные сферы

применения результатов работы, формулируются цель и задачи работы, приводится краткое содержание работы по главам.

В **первой главе** рассмотрены основные физические механизмы изменения микроструктуры при деформировании материалов с различной ЭДУ, имеющиеся в литературе экспериментальные данные, существующие модели для описания процессов пластического формоизменения поликристаллических металлов и сплавов (в том числе – при сложном нагружении).

В **п.1.1** анализируются известные результаты экспериментальных исследований неупругого деформирования образцов из поликристаллических металлов и сплавов с разной ЭДУ. Приведен обзор и классификация натуральных экспериментов материалов с разной ЭДУ на простое и сложное, монотонное и циклическое деформирование, описание наблюдаемых явлений (эффект Баушингера, запаздывание векторных свойств, дополнительное циклическое упрочение (ДЦУ), выход амплитудных значений напряжений на стационарные значения при циклических нагружениях с фиксированной амплитудой по деформациям).

В **п.1.2** описаны основные физические механизмы и особенности эволюции дефектной микроструктуры при простом и сложном, монотонном и циклическом нагружении образцов из сплавов с различной величиной ЭДУ. Приведен обзор работ по теоретическим и экспериментальным методам и результатам исследования эволюции плотностей дефектов (физические модели для описания движения краевых дислокаций, образования дислокационных петель и барьеров, переходу дислокаций через границы зёрен). Произведён анализ механизмов эволюции плотностей дефектов (образование и аннигиляция дислокаций, образование барьеров на расщепленных дислокациях).

В **п.1.3** приведён обзор существующих моделей для описания процессов пластического деформирования, включающих сложное монотонное и циклическое нагружение, отмечаются недостатки и достоинства существующих макрофеноменологических и физически-ориентированных моделей. Проведён качественный анализ моделей (количество уровней, описываемые физические механизмы, используемые внутренние переменные, количество параметров каждой модели, экспериментальные данные, необходимые для их идентификации, границы применимости таких моделей), проанализированы результаты применения моделей.

Во **второй главе** приведены концептуальная и математическая постановка задачи разработки многоуровневой КМ, основное внимание уделено рассмотрению базовой 2-хуровневой (макро- и мезоуровень-1)

упруговязкопластической модели. Элементом мезоуровня-1 является кристаллит (зерно, субзерно), объектом исследования на макроуровне является представительный макрообъем.

В п.2.1. отмечены преимущества применения многоуровневых моделей для исследования пластического деформирования: универсальность, явное описание эволюции микроструктуры, применимость к проектированию функциональных материалов – изделий и др. Следует отметить, что для части параметров моделей существует возможность их установления из известных справочников по физическому металловедению или путём моделирования на нижних структурно-масштабных уровнях (например, методами атомарной динамики). Приведены примеры применения многоуровневых моделей для решения задач механики деформируемого твёрдого тела. Рассмотрена концептуальная постановка базовой двухуровневой модели для описания деформирования поликристаллических материалов, введены основные понятия и положения: представительный объём (ПО), внутренние переменные разных уровней, связи между ними, связи параметров соседних уровней, разложение движения, учёт взаимодействия соседних кристаллитов. Отмечена ограниченность существующей модели для описания процессов сложного циклического деформирования, обуславливающая необходимость ее модификации введением дополнительного структурно-масштабного уровня, позволяющего описать эволюцию плотностей дефектов.

В п.2.2. приведена математическая формулировка базовой 2-уровневой модели: соотношения, классификация переменных и параметров модели. Для связи уровней принята гипотеза Фойгта $\hat{\nabla} \mathbf{v} = \hat{\nabla} \mathbf{V}$, где $\hat{\nabla} \mathbf{v}$ и $\hat{\nabla} \mathbf{V}$ – градиенты вектора скорости перемещений на мезоуровне-1 и макроуровне. Введено разложение движения на квазитвердое и деформационное; определены индифферентные меры скорости деформации $\mathbf{z}(t) = \hat{\nabla} \mathbf{v}^T - \boldsymbol{\omega}$ ($\mathbf{Z}(t) = \hat{\nabla} \mathbf{V}^T - \boldsymbol{\Omega}$) на мезоуровне (макроуровне), где $\boldsymbol{\omega}$ и $\boldsymbol{\Omega}$ – тензоры спинов жестких подвижных систем координат, отвечающих за квазитвердое движение, на мезо-1 и макроуровнях; принято аддитивное разложение меры скорости деформирования на упругую и пластическую составляющую. Система уравнений для описания упруговязкопластического деформирования на мезоуровне-1 имеет следующий вид (номера кристаллитов опущены):

$$\begin{cases} \dot{\boldsymbol{\sigma}} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\omega} - \boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{n} : (\mathbf{z} - \mathbf{z}^{in}), \\ \mathbf{z} = \mathbf{z}^e + \mathbf{z}^{in}, \\ \boldsymbol{\omega} = \dot{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{0}^T, \\ \dot{\mathbf{z}}^{in} = \sum_{k=1}^K \dot{\gamma}^{(k)} \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)}, \\ \tau^{(k)} = \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)} : \boldsymbol{\sigma}, \end{cases}$$

где $\boldsymbol{\sigma}$ – тензор напряжений Коши, \mathbf{z}^e и \mathbf{z}^{in} – упругая и неупругая составляющие меры скорости деформации, $\dot{\gamma}^{(k)}$ – скорости сдвигов на k -й системе скольжения (СС), K – число СС, $\mathbf{b}^{(k)}$ и $\mathbf{n}^{(k)}$ – единичные векторы направления скольжения краевых дислокаций и нормали к плоскости скольжения, $\tau^{(k)}$ – величина касательных напряжений на k -й СС.

В третьей главе рассмотрена структура модификации базовой модели – трехуровневой дислокационно-ориентированной модели для описания упругопластического деформирования поликристаллов, ее математическая формулировка и алгоритмы реализации.

В **п.3.1** представлена концептуальная и математическая постановки подмодели мезоуровня-2, приведены кинетические уравнения для описания эволюции плотностей дефектов. Описаны связи параметров мезоуровня-2 и мезоуровня-1, проведена классификация внутренних переменных. Система уравнений подмодели мезоуровня-2 включает соотношения для определения изменения плотностей дислокаций на СС за счёт аннигиляции и образования новых на источниках Франка-Рида, плотностей образующихся на расщеплённых дислокациях барьеров, закон упрочнения. Введены уравнения для вычисления средних скоростей движения положительных и отрицательных дислокаций $V_{\pm}^{(k)}$, зависящих от величины касательных напряжений $\tau^{(k)}$, температуры θ , плотности положительных и отрицательных дислокаций $\rho_{+}^{(k)}, \rho_{-}^{(k)}$ и плотности барьеров $\rho_{bar}^{(kj)}$ на СС. Скорости сдвигов определяются с использованием модифицированного уравнения Орована в скоростной форме, учитывающего вклад в скорость сдвига по данной системе движения дислокаций обоих знаков по одной СС: $\dot{\gamma}^{(k)} = (\rho_{+}^{(k)} V_{+}^{(k)} - \rho_{-}^{(k)} V_{-}^{(k)}) |\mathbf{b}^{(k)}| (\mathbf{b}^{(k)} - \text{вектор Бюргерса})$. Используется аддитивное разложение скорости изменения критических напряжений сдвига $\dot{\tau}_c^{(k)}$ на составляющие от изменения плотностей взаимодействующих дислокаций по СС $\dot{\tau}_{c_dis}^{(k)}$ и от изменения плотностей барьеров $\dot{\tau}_{c_bar}^{(k)}$; в отсчетной естественной конфигурации критические напряжения определяются сопротивлением решетки $\tau_{c_lat}^{(k)}$. Система уравнений,

описывающая изменение параметров дефектной структуры на мезоуровне-2, имеет следующий общий вид:

$$\begin{cases} V_{\pm}^{(k)} = \pm f_1(\tau^{(k)}, \tau_{c\pm}^{(k)}, \theta, \rho_{\pm}^{(l)}, \rho_{bar}^{(kl)}) \text{sign}(\tau^{(k)}), \\ \dot{\rho}_{\pm}^{(k)} = f_2(\tau^{(k)}, \tau_{c\pm}^{(k)}, \theta, \rho_{\pm}^{(k)}, \rho_{bar}^{(kl)}) \quad (k, l = \overline{1, K}), \\ \dot{\gamma}^{(k)} = (\rho_{+}^{(k)} V_{+}^{(k)} - \rho_{-}^{(k)} V_{-}^{(k)}) |\mathbf{b}^{(k)}|, \\ \dot{\rho}_{bar}^{(kl)} = f_3(\tau^{(k)}, \tau_{c\pm}^{(k)}, \theta, \rho_{\pm}^{(k)}, \rho_{bar}^{(kl)}), \\ \dot{\tau}_{c\pm}^{(k)} = \dot{\tau}_{c_dis\pm}^{(k)} + \dot{\tau}_{c_bar\pm}^{(k)}, \quad \tau_{c0\pm}^{(k)} = \tau_{c_lat}^{(k)}. \end{cases}$$

В п.3.2 представлена конкретизация соотношений для описания эволюции внутренних переменных мезоуровня-2, приведены кинетические уравнения для определения плотностей дефектов решётки (образование и аннигиляция дислокаций, формирование барьеров). Средние скорости движения дислокаций определяются следующими соотношениями (U.F. Kocks):

$$\begin{cases} V_{+}^{(k)} = l^{(k)} v \exp(-\Delta G_{*}^{(k)} / k_B \theta) \text{H}(|\tau^{(k)}| - \tau_{c+}^{(k)}) \text{sign}(\tau^{(k)}), \\ V_{-}^{(k)} = -l^{(k)} v \exp(-\Delta G_{*}^{(k)} / k_B \theta) \text{H}(|\tau^{(k)}| - \tau_{c-}^{(k)}) \text{sign}(\tau^{(k)}), \\ \Delta G_{*}^{(k)} = \frac{\Delta F_{*}^{(k)}}{1 + g \frac{|\tau^{(k)}|}{\tau_{c\pm}^{(k)}}}, \quad l^{(k)} = \alpha \frac{1}{\sqrt{\beta \sum_{l=1}^K \rho_{bar}^{(kl)} + \delta \sum_{l=1}^K \rho^{(l)}}}. \end{cases}$$

где $\Delta F_{*}^{(k)}$, $\Delta G_{*}^{(k)}$ – зависящая от свойств решетки энергия активации движения дислокаций (в отсутствии напряжений и при действии касательного напряжения на СС), k_B – константа Больцмана, H – функция Хэвисайда, $l^{(k)}$ – средняя длина свободного пробега дислокации k -й СС, v – дебаевская частота; g , α , β , δ – безразмерные параметры.

При пластическом деформировании происходит генерация новых дислокаций, в качестве источников дислокаций принимаются источники Франка–Рида, излучающие петли дислокаций. Для описания генерации дислокаций вводится плотность источников Франка–Рида $\rho_{src}^{(k)}$ (м^{-3}), изменение которой описывается следующим соотношением:

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_{src}^{(k)} &= \sum_{j=1}^K L \rho_{bar}^{(kj)} \rho^{(j)} [l^{(j)} v \exp(-\Delta G_{*}^{(j)} / k_B \theta) \text{H}(|\tau^{(j)}| - \tau_c^{(j)})], \\ \rho_{0src}^{(k)} &= \rho_{0src}, \end{aligned}$$

где L – расстояние между препятствиями в источнике, $\rho_{bar}^{(kj)}$ – плотность барьеров на пересечении k и j СС (затрудняющих или препятствующих движению дислокаций по каждой из этих СС), ρ_{0src} – начальная плотность источников. Вклад источника в увеличение плотностей дислокаций пропорционален текущей плотности источников и среднему радиусу петли r_{av} и отличен от нуля только при его активации, критерием которой является превышение действующих касательных напряжений критических напряжений активации τ_{src} (А.Н. Орлов):

$$\dot{\rho}_{nuc}^{(k)} = r_{av} \rho_{src}^{(k)} \nu \left\langle \frac{|\tau^{(k)}|}{\tau_{src}} - 1 \right\rangle^p,$$

$$\tau_{src} = \frac{A\mu|b|}{2\pi L} \left(\ln \frac{L}{r_0} + B \right),$$

где ν – дебаевская частота, A, B, p – безразмерные параметры материала, $\langle \cdot \rangle$ – скобки Маколея ($\langle x \rangle = H(x)x$), μ – модуль сдвига, L – расстояние между препятствиями в источнике, r_0 – минимальная длина закрепленного сегмента, способного генерировать дислокационные петли.

Аннигиляция дислокаций происходит в результате реакции дислокаций одной СС с разными знаками. Данное явление играет большую роль в процессах деформирования, особенно – при реверсивном нагружении. Дислокации разных знаков, принадлежащие одной системе скольжения, притягиваются; при нахождении дислокаций на параллельных системах скольжения они могут переползать в направлении друг к другу, аннигилируя при сближении на расстояние аннигиляции h_{ann} . Количество прореагировавших дислокаций в единицу времени пропорционально заметаемому дислокацией объёму (на единицу длины дислокации) и плотности дислокаций на системах скольжения. Для описания аннигиляции в работе предлагается использовать следующее соотношение (А. Arsenlis):

$$\dot{\rho}_{\pm}^{(k)ann} = -h_{ann} \rho_{+}^{(k)} \rho_{-}^{(k)} |V_{+}^{(k)} - V_{-}^{(k)}|.$$

В п.3.3 приведены соотношения для описания изменения плотности барьеров, образованных расщеплёнными дислокациями, введён закон упрочения, базирующийся на рассмотрении взаимодействия дислокаций друг с другом и с барьерами. Зарождение и эволюция барьеров описывается с использованием построенной автором матрицы плотностей барьеров $R_{bar}^{(kl)}$, в которой единичные значения на пересечении строки k и столбца l означают номера СС, в которых залегают расщепленные дислокации, реагирующие при пересечении с образованием барьеров Ломера – Коттрелла и Хирта;

остальные компоненты матрицы $R_{\text{bar}}^{(kl)}$ – нулевые. Скорость изменения плотности барьеров зависит от плотности дислокаций на реагирующих системах, действующих касательных напряжений и температуры:

$$\dot{\rho}_{\text{bar}}^{(kl)} = \alpha x_d \sum_{k=1}^K R_{\text{bar}}^{(kl)} \rho^{(l)} \rho^{(k)} [l^{(k)} v \exp(-\Delta G_*^{(k)} / k_B \theta)], l = \overline{1, K},$$

$$x_d = \frac{|\mathbf{b}|}{8\pi\epsilon_{SFE}} = \frac{|\mathbf{b}|^2 G}{8\pi\gamma_{SFE}},$$

где $\dot{\rho}_{\text{bar}}^{(kl)}$ – скорость изменения плотности барьеров, образованных на пересечении дислокаций, принадлежащим k -м и l -м СС, α – безразмерный параметр, x_d – средняя ширина расщепления дислокации, G – модуль сдвига, ϵ_{SFE} – безразмерная величина ЭДУ ($\epsilon_{SFE} = \gamma_{SFE} / Gb$, γ_{SFE} – энергия дефекта упаковки). Матрица плотностей барьеров на СС содержит данные обо всех барьерах, которые могут образоваться на расщепленных дислокациях.

При формулировке закона упрочнения принимается гипотеза о возможности аддитивного разделения критических напряжений СС на вклады от сопротивления решётки (величина, зависящая только от температуры), от полей напряжений дислокаций и от образованных на расщеплённых дислокациях барьеров. Для определения составляющей, описывающей влияние накопленных дефектов, было оценено влияние действия своими полями напряжений дислокаций различных СС друг на друга. Для расчета указанных взаимодействий использовано известное решение для определения поля напряжений одиночной дислокации и его действие на другую дислокацию в изотропной упругой среде. Основываясь на данном решении, была построена матрица $M^{(ki)}$, позволяющая оценить напряжения взаимодействия дислокаций k -й и i -й СС, которые заносятся на пересечении k -й строки и i -го столбца матрицы $M^{(ki)}$.

Введение барьера, образованного расщеплёнными дислокациями, как комплекса из двух частичных и сидячей дислокации, позволило оценить влияние барьера на упрочнение k -й СС за счет барьера на i -й СС; для описания этого влияния вводится матрица $V^{(ki)}$, построенная подобно матрице $M^{(ki)}$. Компоненты матриц были нормированы на начальные критические напряжения соответствующих систем скольжения (напряжения Пайерлса) $\tau_{c0}^{(k)} = \tau_{c_lat}^{(k)}$ и являются безразмерными величинами. С использованием введенных матриц эволюционные соотношения для изменения критического напряжения сдвига и его составляющих можно записать в следующем виде:

$$\begin{aligned}\dot{\tau}_c^{(k)} &= \dot{\tau}_{c_dis}^{(k)} + \dot{\tau}_{c_bar}^{(k)}, \quad \tau_{c0}^{(k)} = \tau_{c_lat}^{(k)}, \\ \dot{\tau}_{c_dis}^{(k)} &= \alpha b \tau_{c0}^{(k)} \sum_{i=1}^K \frac{M^{(ki)}}{2\sqrt{\rho^{(i)}}} \dot{\rho}^{(i)}, \\ \dot{\tau}_{c_bar}^{(k)} &= \beta b \tau_{c0}^{(k)} \sum_{i=1}^K \frac{B^{(ki)}}{2\sqrt{\rho_{bar}^{(ki)}}} \dot{\rho}_{bar}^{(ki)},\end{aligned}$$

где α, β – безразмерные параметры материала.

В п.3.4 представлено описание алгоритма реализации модели. В силу существенной нелинейности модели для решения используется пошаговая процедура. На мезоуровне-2 определяющим принимается уравнение для установления скоростей сдвига на СС по плотностям и скоростям движения дислокаций, воздействиями на мезоуровне-2 являются определенные на конец предыдущего шага напряжения в элементах мезоуровня-1. На мезоуровне-2 определяются параметры, характеризующие состояние и изменение дефектной структуры; по плотностям дислокаций и скоростям их движения устанавливаются скорости сдвигов по СС; последние передаются в качестве отклика на мезоуровень-1, где определяется неупругая составляющая меры скорости деформации и скорость изменения тензора напряжений Коши. Осреднением по объему параметров, определенных в элементах мезо-1, на макроуровне (уровне представительного макрообъема материала) устанавливаются параметры макроуровня, в том числе – макронапряжения Σ на конец шага по времени.

Алгоритм решения задачи на мезо-1 и мезо-2 уровнях для каждого временного шага состоит из трех этапов: решения в скоростях, интегрирования и переопределения ВП. Решение в скоростях реализуется в сечениях по времени, определяемых величиной шага. Вычисления компонент тензорных параметров мезоуровня-1 и мезоуровня-2 производятся в базисах жестких подвижных систем координат (ПСК), связанных с решетками соответствующих кристаллитов. При интегрировании, осуществляемом с использованием прямой схемы Эйлера, определение всех переменных на всех уровнях на конец текущего – начало следующего шага по времени устанавливается по скоростям их изменения. По найденным на первом этапе спинам ПСК определяются изменения ориентаций решеток кристаллитов уровней мезо-1 и мезо-2, определяются компоненты тензоров напряжений в базисе лабораторной системы координат, осреднением последних устанавливаются компоненты тензора макронапряжений, после чего происходит переход на следующий шаг по времени.

В четвёртой главе приведены описание и анализ результатов моделирования сложного монотонного и циклического деформирования поликристаллических образцов, произведена оценка адекватности модели на различных материалах и нагрузениях. С использованием численных экспериментов осуществлена проверка способности модели описывать явления, наблюдаемые при циклическом нагружении (выход амплитуд напряжений на стационарные значения при циклических нагружениях с фиксированными амплитудами деформаций, явление ДЦУ, увеличение плотностей дефектов с появлением барьеров на расщеплённых дислокациях).

В п.4.1 представлено описание и результаты реализации процедуры идентификации. Идентификация модели проводилась с использованием данных натуральных экспериментов на простое и сложное циклическое деформирование для материалов с различной величиной ЭДУ и различным химическим составом (меди, латуни, сталей).

В п.4.2 приведено описание и анализ результатов численных экспериментов по простым и сложным циклическим траекториям деформации. Представлены данные об изменении плотностей дефектов в зависимости от вида нагружения и параметров материалов. Особое внимание уделено интенсивности образования барьеров на расщеплённых дислокациях в материалах с различной ЭДУ, а также оценке интенсивности работы систем скольжения в зависимости от типа нагружения.

П.4.3 посвящен детальному рассмотрению зависимости величины дополнительного циклического упрочнения от величины ЭДУ материала и сложности нагружения. Показано, что с уменьшением величины ЭДУ и увеличением сложности программы нагружения возрастает интенсивность образования барьеров дислокационной природы, что ведет к интенсификации ДЦУ. Определена величина ДЦУ Δ_{ad} (из полученных в численных экспериментах на сложное циклическое деформирование максимальных интенсивностей напряжений вычитались максимальные интенсивности напряжений, полученные в экспериментах на простое циклическое нагружение, и разность относилась к последним) в зависимости от отношения амплитуд деформаций растяжения и сдвига P_m , а также угла рассогласования φ . Зависимость величины ДЦУ от сложности нагружения представлена в таблице 1, при следующей программе нагружения:

$$d_{11} = d_{tm} \sin(\omega t), \quad d_{12} = d_{sm} \sin(\omega t + \phi),$$

$$d_{22} = d_{33} = -\frac{1}{2}d_{11}, \quad d_{23} = d_{31} = 0,$$

$$P_m = \frac{d_{sm}}{\sqrt{3}d_{tm}},$$

где d_{ij} – компоненты тензора деформации скорости, d_{tm} , d_{sm} – амплитуды скоростей деформации растяжения и сдвига. На Рис.1 приведены зависимости интенсивности амплитудных напряжений от интенсивности накопленных пластических деформаций для образцов из меди (с относительно высокой ЭДУ) и латуни (с более низкой ЭДУ) по данному закону деформирования при следующих параметрах: $d_{tm}=5.7 \times 10^{-4} \text{ с}^{-1}$, $d_{sm}=1 \times 10^{-3} \text{ с}^{-1}$, $\omega=0.243 \text{ с}^{-1}$, $\phi=60^\circ$.

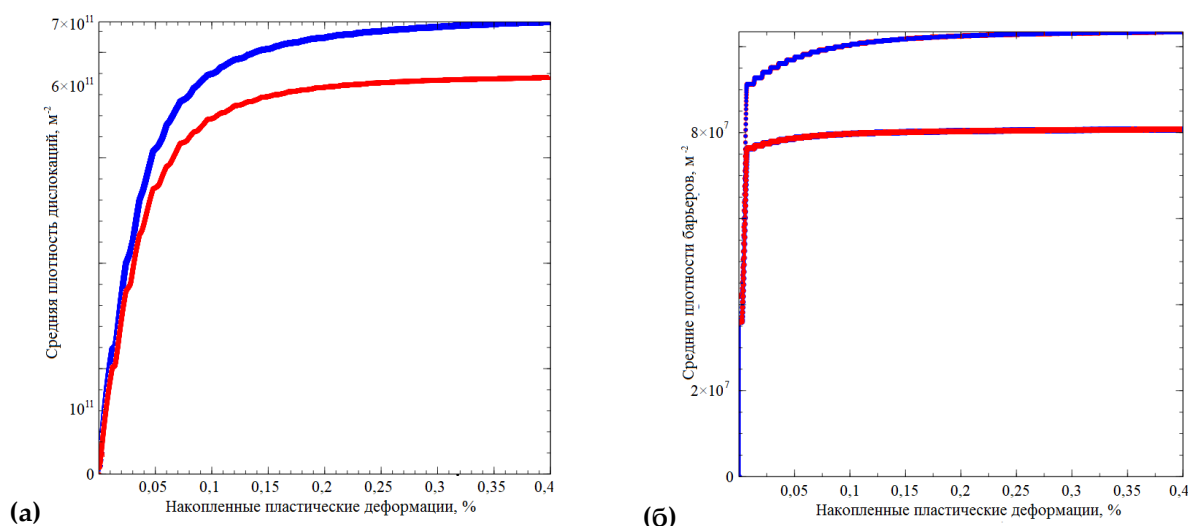


Рис.1 Зависимость средней плотности дислокаций (а) и средней плотности барьеров (б) при циклическом непропорциональном нагружении образцов из меди (красный) и латуни (синий)

Таблица 1. Зависимость ДЦУ от степени непропорциональности (ϕ, P_m) поликристаллов меди и латуни, 125 кристаллитов

Материал	P_m	ϕ , угол	Δ_{ad} , %	ϕ , угол	Δ_{ad} , %
Медь	1	15	5,1	60	6,4
		30	5,2	75	7,0
		45	6,1	90	7,1
Латунь	1	15	11,1	60	13,1
		30	12,3	75	16,1
		45	12,8	90	23,1
Материал	ϕ , угол	P_m	Δ_{ad} , %	P_m	Δ_{ad} , %

Медь	33	0,25	1,1	0,75	4,1
		0,5	1,2	1	5,2
Латунь	33	0,25	6,1	0,75	11,1
		0,5	10,3	1	12,3

Были проведены численные эксперименты для других материалов при различных траекториях циклического деформирования. На рис.2 приведены диаграммы циклического нагружения образцов из стали AISI 304 (аналог стали 08X18H10) по траекториям деформации в виде эллипса и квадрата. Сопоставление полученных численных результатов с известными экспериментальными данными позволяет констатировать, что предлагаемая модель качественно и количественно удовлетворительно устанавливает величину ДЦУ для различных материалов для широких классов циклических нагружений.

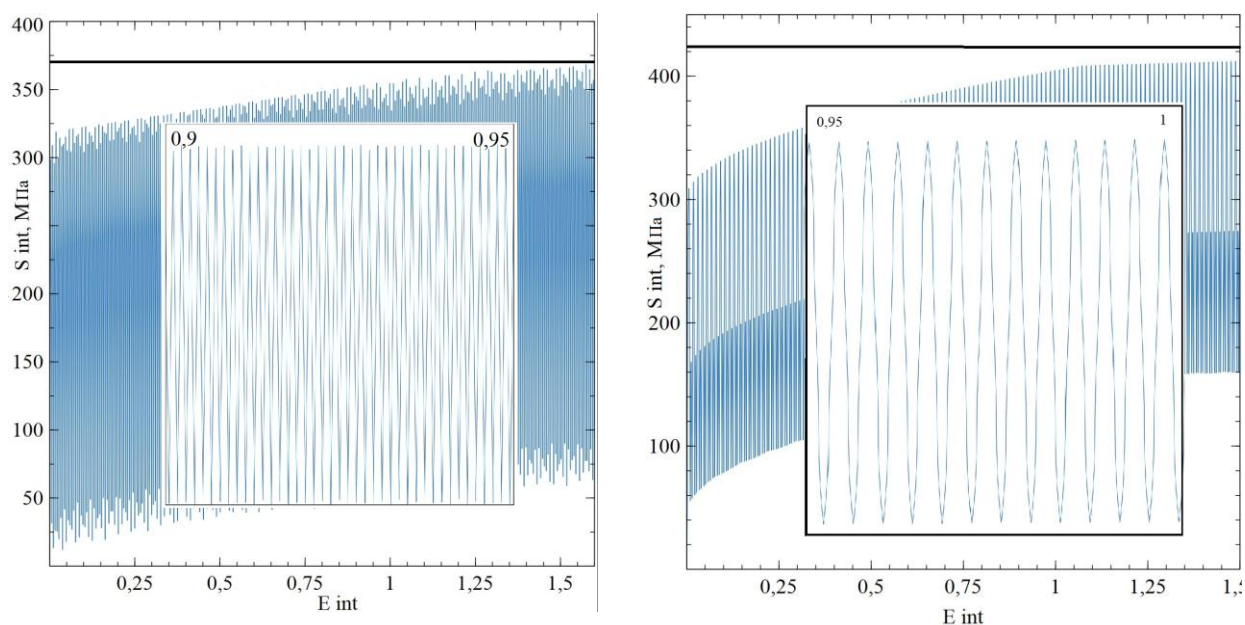


Рис.2 Зависимость интенсивности напряжений от интенсивности накопленных деформаций образца из стали при нагружении по эллиптической траектории (левый) и квадратной (правый) траекториям в двумерном подпространстве пятимерного пространства деформаций А.А. Илюшина, прямая чёрная линия – уровень интенсивности напряжений при установившемся режиме, определённый экспериментально (Doong, 1991)

В заключении сформулированы основные результаты диссертационной работы:

1. На основе обзора существующих макрофеноменологических моделей, применяемых для описания ДЦУ, выявлены недостатки, связанные со

сложностью их строения и необходимостью проведения большого числа натуральных экспериментов для определения параметров моделей.

2. Предложена модификация базовой двухуровневой конститутивной модели, основанной на физической теории упруговязкопластичности, дополненная подмоделью для описания эволюции дефектной структуры; предложенная модифицированная трехуровневая модель позволяет описывать процессы произвольного нагружения (включая непропорциональное циклическое) представительного макрообъема поликристаллических материалов с различной величиной ЭДУ.
3. Предложены модифицированные уравнения для описания эволюции плотностей дефектов
4. Предложена модификация закона упрочнения, позволяющая в явном виде описывать влияние на критические напряжения сдвига плотностей дислокаций и барьеров, образуемых на расщеплённых дислокациях.
5. Показано удовлетворительное соответствие результатов численного моделирования данным натуральных экспериментов по сложному циклическому деформированию материалов с различной величиной ЭДУ.

Основные публикации по теме диссертации:

1. Volegov P.S., Trusov P.V., Gribov D.S. Investigation of the features of polycrystals complex loading using a two-level crystal plasticity theory // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. –2015. –Vol.71 . – № 012071 (6 p.). (**Web of Science, Scopus**)
2. Грибов Д.С., Трусов П.В. Трёхуровневая упруговязкопластическая модель: анализ влияния величины энергии дефекта упаковки на отклик материалов при сложном нагружении // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2020. – №4. – С.60-73. (**Scopus**)
3. Gribov D.S., Popov F.S., Trusov P.V. Three-level elastic-viscoplastic model: The influence of the evolution of the dislocation substructure on the behavior of polycrystals under complex cyclic loading // AIP Conference Proceedings. –2020. –Vol.2310, Is.1. –020114 (5 p.). (**Scopus**)
4. Trusov P.V., Gribov D.S. The three-level elastoviscoplastic model and its application to describing complex cyclic loading of materials with different stacking fault energies// Materials. – 2022. – Vol.15 (3). – № 760 (17 p.). (**Web of Science, Scopus**)
5. Трусов П.В., Грибов Д.С. Дислокационно-ориентированная трёхуровневая модель для описания деформирования поликристаллов: структура, алгоритм реализации, некоторые результаты применения для исследования сложного циклического нагружения// Физическая мезомеханика. – 2022. – Т.25, №4 [в печати] (**ВАК**)
6. Трусов П.В., Грибов Д.С. Дислокационно-ориентированная трёхуровневая модель для описания деформирования поликристаллов: структура, алгоритмы реализации, результаты применения для исследования сложного нагружения // Вычислительная механика сплошных сред. – 2022. – Т.15, №3. – С.274-287. (**Scopus**)

7. Трусов П.В., Янц А.Ю., Грибов Д.С., Курмоярцева К.А. «Упруговязкопластическая математическая модель кристаллита с соотношениями в скоростной форме в актуальной конфигурации с учётом эволюции дислокационной структуры» («УВПММ с ЭДС»). – Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2020665918 ОТ 25.11.2020.

Подписано в печать ДД ММ 2022 г.
Формат 60 x 90/16. Набор компьютерный.
Усл. печ. л. 1. Тираж 100 экз. Заказ №

Отпечатано с готового оригинал-макета в типографии издательства
Пермского национального исследовательского политехнического университета.
Адрес: 614990, г. Пермь, пр-т Комсомольский, 29, к. 113. Тел. (342) 219-80-33