На правах рукописи

Остапович Кирилл Вадимович

ПРОЕКТИРОВАНИЕ РАЦИОНАЛЬНО ТЕКСТУРИРОВАННЫХ ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ИЗДЕЛИЙ НА ОСНОВЕ ДВУХУРОВНЕВОЙ СТАТИСТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ УПРУГОВЯЗКОПЛАСТИЧЕСКОГО ДЕФОРМИРОВАНИЯ

1.2.2 – Математическое моделирование, численные методы
и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Пермь – 2023

Работа выполнена в Федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Пермский национальный исследовательский политехнический университет».

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

Официальные оппоненты: **Кривилев Михаил Дмитриевич,**
доктор физико-математических наук, доцент

Маркин Алексей Александрович,
доктор физико-математических наук, профессор

Ведущая организация: Институт физики прочности и материаловедения СО РАН

Защита диссертации состоится «__» ________ 2023 года в ____ 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, ауд. 423,
тел: (342) 237-84-61; факс: (342) 237-84-87.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке и на сайте ФГАОУ ВО «Пермский национальный исследовательский политехнический университет» (https://pstu.ru).

Автореферат разослан «__»________ 2023 года.

Ученый секретарь
диссертационного совета Д ПНИПУ.01.19
кандидат физико-математических наук Е.Л. Кротова

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы исследования и степень разработанности.

Повышение требований к эксплуатационным качествам современных деталей и конструкций обусловливает интерес к проблемам проектирования изделий, наилучшим образом адаптированных под конкретные условия функционирования. Многочисленные теоретические и экспериментальные исследования показывают, что свойства материалов определяются их строением на нижележащих масштабных уровнях. В этой связи возникают задачи создания в изготавливаемом изделии внутренней структуры, обеспечивающей для него оптимальные рабочие качества. Многие физико-механические свойства поликристаллических металлов и сплавов в значительной степени зависят от кристаллографической текстуры – неоднородностей распределения ориентаций решеток составляющих их кристаллитов. В таких материалах появление текстуры может приводить к возникновению макроскопической анизотропии, согласованность которой с конкретными воздействиями, предусмотренными эксплуатацией проектируемых изделий, определяет качество их функционирования. Некоторые примеры подобного влияния на упругие, пластические, термические и магнитные характеристики приведены в статьях P. Acar, S. Acharjee, S. Kalidindi, H. Kuramae, N. Zabaras и других, а также публикациях [1–3]. В области изучения анизотропии, в особенности – упругой симметрии, можно отметить работы Б.Д. Аннина, Е.К. Ашкенази, А.А. Маркина, Е.А. Митюшова, Н.И. Остросаблина, Б.Е. Победри, Я. Рыхлевского, Д.В. Христича, К.Ф. Черных и других.

Достаточно полное для большинства исследований количественное описание текстуры в поликристалле дается мерой распределения ориентаций (МРО). Данное отображение ставит в соответствие каждому борелевскому подмножеству ориентационного пространства объемную долю кристаллической решетки, которая на него приходится. Следует заметить, что во многих приложениях обычно оперируют не с МРО, а с ее плотностью, называемой также функцией распределения ориентаций (ФРО). В общем случае МРО относится к представительному объему поликристалла, поэтому на конфигурации материала имеет смысл рассматривать ее поле (ПМРО). На практике эффективными способами получения тех или иных ПМРО являются методы интенсивной пластической деформации. Посредством рационального подбора режимов такого деформирования в технологических операциях формирования изделий можно добиться создания в них текстур, определяющих поля макроскопических свойств для улучшенного качества функционирования.

Физически обоснованный подход решению проблем обозначенного класса предполагает моделирование поведения материалов как иерархически упорядоченных систем. Важным аспектом при этом является возможность адекватного описания деформационного текстурообразования в условиях сложного нагружения. В последние десятилетия для этой цели активно применяется многоуровневый подход на базе физических теорий упруговязкопластичности. Подобные модели описывают состояние деформируемого материала на требуемых структурно-масштабных уровнях в терминах так называемых внутренних переменных. Изменение их значений устанавливается с использованием соответствующих эволюционных соотношений, как правило, имеющих структуру систем алгебраических и обыкновенных дифференциальных уравнений. Данный подход, в отличие от известных макрофеноменологических теорий, позволяет включить в рассмотрение различные дефекты кристаллического строения, в частности – краевые дислокации, являющиеся носителями ключевых механизмов неупругой деформации. Основополагающие работы в указанном направлении принадлежат J.F.W. Bishop, C.F. Elam, R. Hill, T.H. Lin, G. Sachs, G.I. Taylor и другим. Значительный вклад в их развитие был внесен зарубежными исследователями, например, L. Anand, R.J. Asaro, C.A. Bronkhorst, A.M. Habraken, M.F. Horstemeyer, S.R. Kalidindi, M. Kothari, D.L. McDowell, F. Roters, P. Van Houtte и другими. Среди отечественных ученых можно выделить Р.Р. Балахонова, А.Е. Волкова, М.Д. Кривилева, В.А. Лихачева, П.В. Макарова, В.Г. Малинина, В.Е. Панина, В.А. Романову, В.В. Рыбина, П.В. Трусова и других.

В обозначенном контексте рационального проектирования нередко употребляется термин «функциональные материалы». При этом, как правило, подразумеваются материалы с адаптированными свойствами, обеспечивающими требуемый отклик на заданные воздействия. Следует заметить, что требования к отклику должны основываться на анализе условий эксплуатации детали или конструкции в целом, а потому представляется более корректным говорить о «функциональных материалах-изделиях». Соответствующие процедуры проектирования целесообразно реализовывать поэтапно: от определения внутренней структуры изделия, оптимальной для конкретных нагружений, до подбора наилучших параметров заготовки и режимов обработки, направленных на ее формирование. Для исследуемого в работе класса проблем в роли ключевой характеристики такой структуры выступает ПМРО. В общем случае каждый из этапов предполагает рассмотрение обратной контактной начально-краевой задачи с использованием в качестве определяющих соотношений материала многоуровневой (конститутивной) модели. В настоящее время аппарат решения подобных задач развит недостаточно; некоторые наработки в этой области представлены в исследовательских и обзорных публикациях S. Acharjee, B.L. Adams, S. Ganapathysubramanian, J. Houskamp, S.R. Kalidindi, H. Kuramae, D.L. McDowell, E. Nakamachi, G.B. Olson, G. Proust, V. Sundararaghavan, N. Zabaras и других. Для комплексных постановок, имеющих практическую значимость и претендующих на физическую адекватность, доведение до вычислительных реализаций существующих приемов оказывается затруднительным. Таким образом, разработка и совершенствование подобных подходов являются актуальными проблемами.

Необходимо заметить, что расчеты даже прямых задач, описывающих реальные процессы интенсивного упруговязкопластического деформирования, имеют высокую ресурсоемкость. Данное обстоятельство обуславливает интерес к так называемым статистическим формулировкам рассматриваемых конститутивных моделей (как наименее затратным в вычислительном плане среди альтернативных постановок). При их использовании материальным точкам деформируемого тела на макроуровне назначаются агрегаты из представительного числа кристаллитов – элементов мезоуровня. Состояние и свойства отдельно взятого кристаллита принимаются однородными и определяются с использованием физически-ориентированной подмодели в зависимости от передаваемых в нее параметров воздействия (градиента скорости деформирования и возможных других). Характеристики отклика (напряжения, упругие модули, вязкопластические деформации, спин в определении коротационной производной и возможные другие) в каждой точке вычисляются осреднением своих мезоскопических аналогов по соответствующему поликристаллическому агрегату.

В диссертации формулируется следующая проблема, для краткости называемая задачей функционально-ориентированного проектирования (ЗФОП). Требуется установить режимы деформирования поликристаллической заготовки, реализующие в готовом изделии ПМРО, рациональное с позиции его дальнейшего функционирования. **Целью работы** является создание на базе статистической двухуровневой конститутивной модели упруговязкопластического деформирования поликристалла вычислительно эффективного подхода к решению ЗФОП.

Основные задачи:

1. Математическая постановка ЗФОП (в виде связанных оптимизационных подзадач, отвечающих стадиям функционирования проектируемого изделия и деформирования его заготовки) с формализованными целевыми критериями и ограничениями.
2. Математическая постановка геометрически нелинейной контактной начально-краевой задачи (на основе статистической двухуровневой конститутивной модели поликристалла), описывающей квазистатические процессы интенсивной упруговязкопластической деформации заготовки с учетом текстурообразования.
3. Разработка алгоритмов для корректного задания в численных расчетах контактных краевых (для скоростной формы уравнения равновесия) и начальных (при наличии предварительной текстуры) условий.

4. Формулировка способа редуцированного представления текстур (с использованием методов кластерного анализа) для определения вычислительно эффективных целевых критериев и ограничений в ЗФОП.
5. Построение последовательности решения ЗФОП и ее реализация на конкретном примере.

Методология и методы исследования. Работа опирается на аппарат математического моделирования, нелинейную механику и физику деформируемого твердого тела, многоуровневый подход к построению определяющих соотношений с введением внутренних переменных, численные методы, теории оптимизации, вероятностей и математической статистики с привлечением элементов функционального анализа и теории групп. Решение начально-краевых задач упруговязкопластического деформирования осуществлялось в рамках метода конечных элементов (МКЭ) в формулировке Галеркина. Обыкновенные дифференциальные уравнения, входящие в конститутивные модели указанных задач, интегрировались по схеме Эйлера. Применяемый для генерации распределений ориентаций кристаллических решеток по заданным полюсным фигурам алгоритм разработан на базе подхода Монте-Карло. Для редуцированного представления текстур использовался специально созданный алгоритм кластеризации в ориентационном пространстве, опирающийся на поиск связных компонент в неориентированном графе и модифицированный в работе медоидный метод. Возникающие различного рода оптимизационные задачи решались с использованием комбинированных квазиградиентных, стохастических и тех или иных эвристических приемов.

Научная новизна:
1. Впервые в общем виде сформулирована ЗФОП и предложен оригинальный алгоритм ее решения, основанный на рассмотрении связанных оптимизационных подзадач, отвечающих стадиям деформационной обработки заготовки и функционирования готового изделия.
2. Предложен новый алгоритм реализации контактных условий в скоростной квазистатической конечно-элементной формулировке начально-краевой задачи деформирования твердого тела.
3. Предложен новый алгоритм типа Монте-Карло генерации выборок ориентаций кристаллических решеток, распределенных в соответствии с заданными полюсными фигурами.
4. Разработан новый метод идентификации текстурных компонент на основе послойной симметрийно-инвариантной кластеризации взвешенных выборок ориентаций кристаллических решеток.
5. Разработан оригинальный метод адаптивного построения пространства текстурных параметров с оценкой их значимости для ЗФОП.
6. Получены результаты, демонстрирующие использование элементов созданного аппарата, в том числе разобранный простой пример реализации всех стадий решения ЗФОП.

Теоретическую значимость работы составляют следующие предложенные в ней подходы:
1. Задание контактных условий для начально-краевой задачи деформирования твердого тела в скоростной конечно-элементной формулировке, производимое посредством перехода к соответствующим смешанным условиям, согласованным с исходными по узловым силам.
2. Редуцированное представление текстуры в поликристаллическом агрегате на основе методов кластерного анализа.
3. Восстановление в дискретной форме меры распределения ориентаций кристаллических решеток по заданным или всюду вычислимым полюсным плотностям с использованием подхода Монте-Карло в рамках статистической интерпретации фундаментального уравнения текстурного анализа.

Практическая значимость работы заключается в применимости указанных подходов для физически обоснованного моделирования технологических процессов интенсивного неупругого деформирования поликристаллических материалов, в том числе при решении проблем типа ЗФОП, а также анализа получаемых в расчетах текстур.

Положения, выносимые на защиту:

1. Математическая постановка и алгоритм решения ЗФОП
2. Алгоритм реализации контактных условий в скоростной квазистатической конечно-элементной формулировке начально-краевой задачи деформирования твердого тела.
3. Алгоритм типа Монте-Карло генерации выборок ориентаций кристаллических решеток, распределенных в соответствии с заданными полюсными фигурами.
4. Метод идентификации текстурных компонент на основе послойной симметрийно-инвариантной кластеризации взвешенных выборок ориентаций кристаллических решеток.
5. Метод адаптивного построения пространства текстурных параметров с оценкой их значимости для ЗФОП.

Достоверность и обоснованность результатов проведенных исследований подтверждается удовлетворительным соответствием численных решений тестовых задач экспериментальным данным.

Апробация работы. Полученные результаты были представлены в докладах автора на конференциях различного уровня: Конгресс «Всероссийский съезд по теоретической и прикладной механике» (Санкт-Петербург: 2023); Всероссийские конференции «Зимняя школа по механике сплошных сред» (Пермь: 2017, 2019, 2021, 2023); Международная конференция «Физическая мезомеханика. Материалы с многоуровневой иерархически организованной структурой и интеллектуальные производственные технологии» (Томск: 2020); Всероссийские школы-конференции молодых ученых «Математическое моделирование в естественных науках» (Пермь: 2016–2020); Международная конференция «Механика, ресурс и диагностика материалов и конструкций» (Екатеринбург: 2018); Международная конференция с элементами научной школы для молодежи «Современные технологии и материалы новых поколений» (Томск: 2017); Международный симпозиум «Неравновесные процессы в сплошных средах» (Пермь: 2017). Полностью диссертационная работа обсуждалась на семинарах кафедры «Математическое моделирование систем и процессов» (руководитель – зав. каф., д.ф.-м.н., проф. П.В. Трусов) Пермского национального исследовательского политехнического университета (ПНИПУ), кафедры «Механика композиционных материалов и конструкций» ПНИПУ (руководитель – и.о. зав. каф., к.т.н. П.В. Писарев), лаборатории «Механика функциональных материалов» Института механики сплошных сред УрО РАН (руководитель – зав. лаб., к.ф.-м.н. С.В. Лекомцев).

Публикации по теме диссертации включают 21 работу, среди которых: 3 статьи в журналах, рекомендованных ВАК; 9 статей в научных изданиях, индексируемых в международных базах цитирования Scopus и/или WoS (в том числе 1 перевод статьи из журнала ВАК); 2 свидетельства о государственной регистрации программы для ЭВМ.

Личный вклад автора:
1. Обзор литературы по теме диссертационного исследования и связанными с ней вопросами выполнен лично автором.
2. Постановка представленных в работе задач осуществлена автором совместно с научным руководителем.
3. Алгоритмы решения поставленных задач и реализующие их программы разработаны лично автором.
4. Расчеты с использованием разработанных программных средств и анализ полученных в них результатов проведены лично автором.
5. Опубликованные статьи по теме диссертационного исследования подготовлены автором совместно с научным руководителем.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из списков сокращений и основных обозначений, введения, четырех глав, заключения, списка цитируемой литературы.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во **введении** обосновывается актуальность выбранной темы и оценивается степень ее разработанности. Ставятся цель и задачи исследования, описываются методологическая база работы, научная новизна, теоретическая и практическая значимости. Формулируются основные положения, выносимые на защиту. Также указываются сведения о достоверности и обоснованности результатов, апробации работы, подготовленных публикациях и личном вкладе автора в решение рассматриваемой проблемы.

Первая глава посвящена математической постановке в общем виде ЗФОП. Приводится обзор работ, имеющих отношение к данному вопросу – публикации S. Acharjee, B.L. Adams, S. Ganapathysubramanian, J. Houskamp, S.R. Kalidindi, H. Kuramae, D.L. McDowell, E. Nakamachi, G.B. Olson, G. Proust, V. Sundararaghavan, N. Zabaras и других.

Даются предварительные определения, на базе которых выстраивается теоретический аппарат работы. Принимаются обозначения: $\mathbb{N}$ – множество натуральных чисел; $\mathbb{R}$ – множество действительных чисел; $\mathbb{R}^+, |\mathbb{R}| \subset \mathbb{R}$ – подмножества положительных, неотрицательных чисел соответственно; $\mathbb{E}_3$ – трехмерное евклидово пространство над $\mathbb{R}$ с операцией скалярного произведения, обозначаемой «$\cdot$»; $\mathbb{E}_3^{(R)}$ – пространство тензоров ранга $R \in \{0\} \bigcup \mathbb{N}$ над $\mathbb{E}_3$ (полагается $\mathbb{E}_3^{(0)} = \mathbb{R}$). Вводится $\mathbb{O}^+ \subset \mathbb{E}_3^{(2)}$ – группа собственно ортогональных тензоров. Каждый такой тензор взаимно-однозначно соответствует некоторому преобразованию поворота векторов из $\mathbb{E}_3$ и может использоваться для задания пространственной ориентации трехмерного тела (например, кристаллической решетки). С учетом этого, всюду под ориентаций подразумевается некоторый элемент $\mathbf{o} \in \mathbb{O}^+$. Через $\mathcal{E}^{\mathrm{cl}}$ обозначается система регулярно замкнутых (то есть являющихся замыканиями открытых) подмножеств в $\mathbb{E}_3$, представляющих собой возможные конфигурации сплошных тел. Определяется $\mathcal{O}^+$ – борелевская сигма-алгебра подмножеств в $\mathbb{O}^+$. Под МРО в работе понимается произвольное отображение $\Phi : \mathcal{O}^+ \to [0,1]$, удовлетворяющее условию нормировки: $\Phi(\mathbb{O}^+) = 1$. Величина $\Phi(\mathscr{O}) \in [0,1]$ трактуется как объемная доля решетки в поликристалле, обладающей ориентацией во множестве $\mathscr{O} \in \mathcal{O}^+$. ПМРО на фиксированной конфигурации $\mathscr{K}$ в этом случае допустимо рассматривать как отображение вида $\Phi : \mathscr{K} \times \mathcal{O}^+ \to [0,1]$, значение $\Phi(\mathbf{R}, \mathscr{O}) \in [0,1]$ которого в материальной точке конкретизируется радиус-вектором $\mathbf{R} \in \mathscr{K}$. Через U обозначается однородная МРО, задающая инвариантный объем (меру Хаара) на $\mathbb{O}^+$. ФРО называется отображение вида $\phi : \mathbb{O}^+ \to |\mathbb{R}|$, являющееся производной в смысле Радона-Никодима от МРО по U.

ЗФОП формулируется в виде системы из двух связанных оптимизационных подзадач, отвечающих стадиям функционирования готового изделия и деформационной обработки заготовки. Первая из них, называемая F-подзадачей, предполагает поиск ПМРО $\hat{\Phi}$ на конфигурации $\mathscr{P}$ изделия, обеспечивающего для него наилучшее функционирование:

$$F_0(\hat{\Phi}) = \min\nolimits_{\Phi \in \mathscr{F}} F_0(\Phi); \quad F_c(\hat{\Phi}) \le 0, \; c \in \overline{1, N_{\mathrm{fc}}}.$$

Здесь $\mathscr{F}$ – множество некоторым образом параметризованных ПМРО; $F_0 : \mathscr{F} \to \mathbb{R}$ – критерий качества функционирования; $\{F_c : \mathscr{F} \to \mathbb{R}\}$ – функционалы ограничений ($c \in \overline{1, N_{\mathrm{fc}}}$, где $N_{\mathrm{fc}} \in \{0\} \bigcup \mathbb{N}$ – количество ограничений F-подзадачи). Вторая, или T-подзадача, состоит в нахождении вектор-строки $\hat{\tau} \in \mathbb{R}^{N_{\mathrm{tv}}}$ переменных, управляющих режимом деформирования заготовки (ВСУП; $N_{\mathrm{tv}} \in \mathbb{N}$ – размерность T-подзадачи), для которой на $\mathscr{P}$ реализуется ПМРО, наиболее близкое к $\hat{\Phi}$:

$$T_0(\Phi(\hat{\tau}), \hat{\Phi}) = \min\nolimits_{\tau \in \mathscr{T}} T_0(\Phi(\tau), \hat{\Phi}); \quad T_c(\hat{\tau}) \le 0, \; c \in \overline{1, N_{\mathrm{tc}}}.$$

Через $\mathscr{T}$ выше записано множество возможных значений ВСУП; $T_0 : \mathscr{F}^2 \to |\mathbb{R}|$ – критерий близости ПМРО; $\{T_c : \mathscr{T} \to \mathbb{R}\}$ – функционалы ограничений ($c \in \overline{1, N_{\text{tc}}}$, где $N_{\text{tc}} \in \{0\} \bigcup \mathbb{N}$ – количество ограничений Т-подзадачи). Важнейшим элементом приведенной постановки является оператор $\Phi : \mathscr{T} \to \mathscr{F}$, определяющий $\Phi(\tau) \in \mathscr{F}$ как ПМРО на $\mathscr{P}$ в зависимости от предшествующего режима деформирования заготовки, отвечающего ВСУП $\tau \in \mathscr{T}$. В общем случае каждое вычисление этого отображения предполагает полный расчет рассматриваемой технологической операции.

Во **второй главе** формулируется геометрически нелинейная начально-краевой задача для описания квазистатического интенсивного упруговязкопластического деформирования поликристаллических материалов с учетом текстурообразования. При моделировании подобных процессов некоторыми преимуществами обладает использование скоростного аналога уравнения равновесия, получаемого из стандартного дифференцированием по времени. В разрешающую систему задачи в этом случае явно входят соответствующие первые производные от тензора напряжений Коши, а также скорости перемещений материальных точек. Как показывает проведенный обзор литературы, постановки такого рода не являются традиционными для контактной механики. Следует заметить, что данной области посвящено значительное количество публикаций; среди основополагающих и обзорных можно отметить работы А. Галина, И.Г. Горячевой, Н.Б. Демкина, М.Н. Добычина, А.С. Кравчука, В.Н. Кукуджанова, А.И. Лурье, В.Л. Попова, И.Я. Штаермана, G. Anagnostou, J.R. Barber, F.B. Belgacem, C. Bernardi, N.G. Bourago, G. Duvaut, X. Q. Feng, H. Hertz, T.A. Laurse, B. Li, P. Li, J.L. Lions, A. A. Nema, T. Pore, M.A. Puso, A. Signorini, J. Solberg, S.G. Thora, K. Zhou, R. Zhou и других. Однако подавляющее большинство встречающихся подходов к численному решению подобных задач оперирует с уравнениями нулевого дифференциального порядка по напряжениям. Для реализации условий контакта в рамках обозначенной скоростной формулировки оказываются необходимыми специальные приемы, разработке которых посвящена соответствующая часть диссертационного исследования.

Отдельного внимания заслуживает вопрос о задании выборки начальных ориентаций кристаллитов в используемой статистической модели поликристалла при наличии предварительной текстуры. В натурных экспериментах, как правило, подобные сведения предоставляются в виде наборов прямых или обратных полюсных фигур. Известно, что МРО или ФРО в таких случаях не могут быть восстановлены полностью, а только лишь тем или иным образом оценены. К настоящему времени созданы многочисленные методы построения подобных оценок, включая различные модификации, а также разработаны реализующие их специализированные программные продукты. Среди известных подходов можно отметить, например, предложенные в публикациях A. Baczmanski, R. Baro, J.J. E. Bechlerferry, H.J. Bunge, M. Dahms, T. Eschner, C. Esling, J.J. Fundenberger, K. Helming, J. Hirsch, J. Imhof, L.K. Jetter, J. Jura, Z.D. Liang, K. Lucke, S. Matthies, C.J. McHargue, K. Pawlik, J. Pospiech, D. Ruer, H. Schaeben, H. Siemes, J. Tarasiuk, A. Vadon, G.W. Vinel, K. Wierzbanowski, R.O. Williams, H.P. Van, F. Wang, J.Z. Xu, Т.М. Ивановой, Т.И. Савеловой, М.В. Сыпченко и других. Следует обратить внимание, что распространенные способы предназначены для получения явного представления возможной ФРО и обычно предполагают полную оцифровку изображений полюсных фигур. В качестве их альтернативы в работе были сформулированы простые с точки зрения реализации алгоритмы типа Монте-Карло, направленные на использование выборочных значений полюсных плотностей для непосредственной генерации требуемых ориентаций.

Задаются: условно-неподвижная эйлерова система координат, принимаемая в качестве лабораторной (ЛСК), местонахождение в которой конкретизируется вектор-строкой $\mathrm{r} = (r^1, r^2, r^3) \in \mathbb{R}^3$; и начальная конфигурация $\mathscr{B}_0$ заготовки, определяющая радиус-векторы исходных позиций ее материальных точек. В момент времени $t \in |\mathbb{R}|$ процесса деформирования точка с начальным положением $\mathbf{R}_0 \in \mathscr{B}_0$ занимает место, характеризуемое радиус-вектором

$\mathbf{r}(t,\mathbf{R}_0)\in\mathbb{E}_3$. Соответствующее отображение $\mathbf{r}:|\mathbb{R}|\times\mathscr{B}_0\to\mathbb{E}_3$ полагается, по крайней мере, дважды непрерывно-дифференцируемым по первому аргументу (именно, t) и для каждого его фиксированного значения действующим как диффеоморфизм (при отображении $\mathbf{R}_0$). В качестве начального момента времени принимается $t=0$, так что $\mathbf{r}(0,\mathbf{R}_0)=\mathbf{R}_0$.

Вводится деформированная система координат (ДСК), являющаяся лагранжевой $\mathbf{r}$-ассоциированной, с положениями, указываемыми вектор-строкой $\mathrm{q}=(q^1,q^2,q^3)\in\mathbb{R}^3$. Все рассматриваемые далее поля по умолчанию определяются с позиции ДСК и описываются отображениями вида $\mathbf{X}:|\mathbb{R}|\times\mathscr{C}_0\to\mathbb{E}_3^{(R)}$, где $\mathscr{C}_0\subset\mathscr{B}_0$ и $R\in\{0\}\bigcup\mathbb{N}$. В этом случае $\mathbf{X}(t,\mathbf{R}_0)\in\mathbb{E}_3^{(R)}$ трактуется как значение соответствующей характеристики в момент $t\in|\mathbb{R}|$ для материальной точки $\mathbf{R}_0\in\mathscr{C}_0$. Оператор Гамильтона на актуальных конфигурациях задается как $\nabla=\sum_{i=1}^{3}\mathbf{d}^i\,\partial/\partial q^i$, где $\{\mathbf{d}^i:|\mathbb{R}|\times\mathscr{B}_0\to\mathbb{E}_3\}$ – поля векторов сопряженного координатного базиса ДСК ($i\in\overline{1,3}$).

Уравнения сформулированной контактной начально-краевой задачи, описывающие деформирование заготовки на макроуровне, представлены ниже ($t\in|\mathbb{R}|$, $\mathbf{R}_0\in\mathscr{B}_0$):

$$\dot{\mathbf{r}}=\mathbf{v};\quad \nabla\cdot\dot{\boldsymbol{\Sigma}}-\nabla\mathbf{v}:\nabla\boldsymbol{\Sigma}=\mathbf{0},\ \mathbf{R}_0\in\operatorname{int}\mathscr{B}_0;\quad \dot{\boldsymbol{\Sigma}}+\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{\Omega}-\boldsymbol{\Omega}\cdot\boldsymbol{\Sigma}=\boldsymbol{\Pi}:\mathbf{Z}^{\mathrm{e}};\quad \mathbf{Z}^{\mathrm{e}}=\nabla\mathbf{v}^{\mathrm{T}}-\boldsymbol{\Omega}-\mathbf{Z}^{\mathrm{vp}}.$$

Здесь обозначены следующие поля векторных и тензорных величин в материальных точках: $\mathbf{v}:|\mathbb{R}|\times\mathscr{B}_0\to\mathbb{E}_3$ – скорости перемещений; $\boldsymbol{\Sigma},\boldsymbol{\Omega},\mathbf{Z}^{\mathrm{e}},\mathbf{Z}^{\mathrm{vp}}:|\mathbb{R}|\times\mathscr{B}_0\to\mathbb{E}_3^{(2)}$ – соответственно напряжений Коши, спина подвижной системы координат (ПСК), относительно которой фиксируются изменения мер напряженного и деформированного состояний, упругой и вязкопластической аддитивных составляющих меры скорости деформирования; $\boldsymbol{\Pi}:|\mathbb{R}|\times\mathscr{B}_0\to\mathbb{E}_3^{(4)}$ – упругих модулей.

При постановке контактных условий деформации инструмента полагаются пренебрежимо малыми, так что граница $\partial\mathscr{T}(t)$ его конфигурации в произвольный момент $t\in|\mathbb{R}|$ может считаться полностью заданной. Совокупность расположенных на ней материальных точек заготовки при этом априори неизвестна и должна быть определена как часть решения задачи. В области (необязательно связной) всех таких геометрически контактирующих точек выделяется подобласть физического контакта, отвечающая действию прижимающих нормальных усилий. Данная подобласть дополнительно подразделяется на зоны прилипания и скольжения – в зависимости от реализуемого режима трения, в рассматриваемой формулировке описываемого законом Кулона-Зибеля. Материальные точки, контактирующие в геометрическом, но не физическом смысле, образуют подобласть отлипания. На оставшейся части поверхности допускается задание стандартных краевых условий, в том числе различного рода смешанных. При численном решении задачи с помощью МКЭ на лагранжевой сетке такие условия обычно реализуются через назначение скоростей перемещений поверхностных узлов и изменений действующих в них сил. Этот же подход предлагается применять и для учета контактных взаимодействий. Для дискретизированной заготовки, таким образом, возможной контактирующей единицей считается узел, а для инструмента – поверхность или ее фасетка.

В таблице 1 приведены соотношения для определения конфигураций введенных выше материальных областей на фиксированном временном срезе, отвечающего моменту $t\in|\mathbb{R}|$, а также их узловые аналоги в МКЭ. Приняты обозначения: $\mathbf{n}:|\mathbb{R}|\times\partial\mathscr{B}_0\to\mathscr{S}$ – поле вектора внешней нормали; $\mathbf{I}\in\mathbb{E}_3^2$ – единичный тензор; $p^{\mathrm{t}}:|\mathbb{R}|\times\partial\mathscr{B}_0\to|\mathbb{R}|$ – поле критического напряжения трения покоя ($t\in|\mathbb{R}|$, $\mathbf{R}_0\in\partial\mathscr{B}_0$):

$$p^{\mathrm{t}}=\min\left\{-\mu\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\Sigma}\cdot\mathbf{n},\tau^{\mathrm{y}}\right\},$$

где $\mu \in |\mathbb{R}|$ – коэффициент трения между материалами заготовки и инструмента, $\tau^{\text{y}} : |\mathbb{R}| \times \partial\mathscr{B}_0 \to |\mathbb{R}|$ – поле предела текучести на сдвиг (в общем случае устанавливаемое с использованием отдельной подмодели); $\{\overline{\mathscr{b}}_0^{(m)} \subset \partial\mathscr{B}_0\}$ – конфигурации материальных подобластей, отвечающих действию заданных смешанных условий различного рода при отсутствии геометрического контакта ($m \in \overline{0,3}$). В соотношениях МКЭ множество номеров граничных узлов сетки заготовки определяется $\mathscr{p} \subset \overline{1, N_{\text{n}}}$ (где $N_{\text{n}} \in \mathbb{N}$ – общее количество узлов). Поверхность инструмента описывается нулевыми значениями функции $T : |\mathbb{R}| \times \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}$. На зафиксированном срезе по времени в базисе ЛСК для узлов вычисляются следующие вектор строки ($p \in \mathscr{p}$): $\{\mathrm{n}_p^{\text{c}}, \mathrm{f}_p \in \mathbb{R}^3\}$ – компонент соответственно единичных внешних нормалей к поверхности инструмента (в соприкасающихся узлах заготовки) и действующих сил; $\{f_p^{\text{t}} \in |\mathbb{R}|\}$ – критические силы трения покоя:

$$f_p^{\text{t}} = \min\left\{\mu\, \mathrm{n}_p^{\text{c}}\, \mathrm{f}_p^{\mathrm{T}},\, f_p^{\text{y}}\right\},$$

в определении которых $\{f_p^{\text{y}} \in |\mathbb{R}|\}$ – силовые аналоги предела текучести на сдвиг; $\{\overline{\mathscr{p}}^{(m)} \subset \mathscr{p}\}$ – подмножества номеров граничных узлов, отвечающие заданным $\overline{\mathscr{b}}_0^{(m)}$. Для полей вида $\mathbf{x} : |\mathbb{R}| \times \mathscr{C}_0 \to \mathbb{E}_3$, где $\mathscr{C}_0 \subset \mathscr{B}_0$, через $\{\mathrm{x}_p \in \mathbb{R}^3\}$ по умолчанию обозначаются вектор-строки компонент их узловых значений на этом же срезе ($p \in \mathscr{Q}$, где $\mathscr{Q} \subset \overline{1, P}$ зависит от $\mathscr{C}_0$).

Таблица 1. Конфигурации материальных областей действия краевых условий различного типа и их представление в виде множеств номеров узлов в МКЭ

Тип	Конфигурация материальной области	Множество номеров узлов
Геометрический контакт	$\mathscr{b}_0^{\text{c}} = \left\{\mathbf{R}_0 \in \partial\mathscr{B}_0 \mid \mathbf{r} \in \partial\mathscr{T}\right\}$	$\mathscr{p}^{\text{c}} = \left\{p \in \mathscr{p} \mid T(t, \mathrm{r}_p) = 0\right\}$
- Физический контакт	$\mathscr{b}_0^{\text{p}} = \left\{\mathbf{R}_0 \in \mathscr{b}_0^{\text{c}} \mid \mathbf{n}\cdot\mathbf{\Sigma}\cdot\mathbf{n} < 0\right\}$	$\mathscr{p}^{\text{p}} = \left\{p \in \mathscr{p}^{\text{c}} \mid \mathrm{n}_p^{\text{c}}\, \mathrm{f}_p^{\mathrm{T}} > 0\right\}$
-- Прилипание	$\mathscr{b}_0^{\text{a}} = \left\{\mathbf{R}_0 \in \mathscr{b}_0^{\text{p}} \mid \left\Vert\mathbf{n}\cdot\mathbf{\Sigma}\cdot\left(\mathbf{I} - \mathbf{nn}\right)\right\Vert < p^{\text{t}}\right\}$	$\mathscr{p}^{\text{a}} = \left\{p \in \mathscr{p}^{\text{p}} \mid \mathrm{f}_p\, \mathrm{f}_p^{\mathrm{T}} - \left(\mathrm{n}_p^{\text{c}}\, \mathrm{f}_p^{\mathrm{T}}\right)^2 < \left(f_p^{\text{t}}\right)^2\right\}$
-- Скольжение	$\mathscr{b}_0^{\text{s}} = \mathscr{b}_0^{\text{p}} \setminus \mathscr{b}_0^{\text{a}}$	$\mathscr{p}^{\text{s}} = \mathscr{p}^{\text{p}} \setminus \mathscr{p}^{\text{a}}$
- Отлипание	$\mathscr{b}_0^{\text{f}} = \mathscr{b}_0^{\text{c}} \setminus \mathscr{b}_0^{\text{p}}$	$\mathscr{p}^{\text{f}} = \mathscr{p}^{\text{c}} \setminus \mathscr{p}^{\text{p}}$
Смешанное, $m \in \overline{0,3}$	$\mathscr{b}_0^{(m)} = \overline{\mathscr{b}}_0^{(m)} \setminus \mathscr{b}_0^{\text{c}}$	$\mathscr{p}^{m} = \overline{\mathscr{p}}^{m} \setminus \mathscr{p}^{\text{c}}$

Таблица 2 содержит выражения краевых условий сформулированной задачи и предлагаемые равенства для их реализации в рамках МКЭ. В приведенных соотношениях: $\bar{\mathbf{v}}^{\text{c}} : |\mathbb{R}| \times \mathscr{b}_0^{\text{c}} \to \mathbb{E}_3$ – поле вектора скорости точек поверхности инструмента (в соприкасающихся материальных точках заготовки); $\mathbf{t} : |\mathbb{R}| \times \mathscr{b}_0^{\text{s}} \to \mathscr{S}$ – поле вектора направления проскальзывания относительно инструмента ($t \in |\mathbb{R}|$, $\mathbf{R}_0 \in \mathscr{b}_0^{\text{s}}$):

$$\mathbf{t} = \left(\mathbf{v} - \bar{\mathbf{v}}^{\text{c}}\right) \big/ \left\Vert\mathbf{v} - \bar{\mathbf{v}}^{\text{c}}\right\Vert,$$

где $\Vert\ \Vert : \mathbb{E}_3 \to |\mathbb{R}|$ – гильбертова (евклидова) норма; $\mathbf{b} : |\mathbb{R}| \times \mathscr{b}_0^{\text{s}} \to \mathscr{S}$ – поле вектора бинормали на поверхности инструмента: $\mathbf{n}\cdot\mathbf{b} = \mathbf{t}\cdot\mathbf{b} = 0$; $\{\mathbf{b}^j : |\mathbb{R}| \times \mathscr{b}_0^{\text{c}} \to \mathscr{S}\}$ – поля попарно ортогональных базисных векторов, формирующих граничный базис для задания смешанных условий ($j \in \overline{1,3}$); $\{\bar{v}'^k, \bar{q}'^l : |\mathbb{R}| \times \overline{\mathscr{b}}_0^{(m)} \to \mathbb{R}\}$ – поля фиксируемых в граничном базисе компонент скоростей соответственно перемещений и изменений сил ($k \in \overline{1,m}$, $l \in \overline{m+1,3}$, $m \in \overline{0,3}$). Заметим, что с целью обеспечения ортогональности $\{\mathrm{n}_p^{\mathrm{c}}\}$ с соответствующими $\{\mathrm{t}_p, \mathrm{b}_p\}$ в рамках численной реализации последние следует несколько переопределить ($p \in \mathscr{p}^{\mathrm{s}}$):

$$\mathrm{t}_p = \mathrm{v}_p^{\mathrm{rt}} \Big/ \sqrt{\mathrm{v}_p^{\mathrm{rt}} \mathrm{v}_p^{\mathrm{rt}\mathsf{T}}}; \quad \mathrm{v}_p^{\mathrm{rt}} = \mathrm{v}_p^{\mathrm{r}} - \left(\mathrm{n}_p^{\mathrm{c}}\, \mathrm{v}_p^{\mathrm{r}\mathsf{T}}\right) \mathrm{n}_p^{\mathrm{c}}; \quad \mathrm{v}_p^{\mathrm{r}} = \mathrm{v}_p - \overline{\mathrm{v}}_p^{\mathrm{c}}.$$

Для произвольной характеристики x через $\overleftarrow{x}$ обозначается ее величина с предшествующего временного среза. Компоненты $\{\overline{v}_p'^k \in \mathbb{R}\}$ отвечают задаваемым в узлах значениям $\{\overline{v}'^k\}$, а $\{\overline{g}_p'^l \in \mathbb{R}\}$ – скоростям изменения сил, эквивалентных распределенным $\{\overline{q}'^l\}$ ($p \in \mathscr{p}^{(m)}, k \in \overline{1,m}$, $l \in \overline{m+1,3}$, $m \in \overline{0,3}$). Построению алгоритма численного решения контактной задачи посвящена публикация [13].

Таблица 2. Соотношения, задающие краевые условия различного типа и их реализация в МКЭ

Тип	Соотношения	Реализация
Прилипание	$\mathbf{v} = \overline{\mathbf{v}}^{\mathrm{c}},\ \mathbf{R}_0 \in \mathscr{b}_0^{\mathrm{a}}$	$\mathrm{v}_p = \overline{\mathrm{v}}_p^{\mathrm{c}},\ \ p \in \mathscr{p}^{\mathrm{a}}$
Скольжение	$\left.\begin{array}{r} \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} = \mathbf{n} \cdot \overline{\mathbf{v}}^{\mathrm{c}} \\ \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\Sigma} = p^{\mathrm{t}} \mathbf{t} \end{array}\right\} \mathbf{R}_0 \in \mathscr{b}_0^{\mathrm{s}}$	$\left.\begin{array}{r} \mathrm{n}_p^{\mathrm{c}}\, \mathrm{v}_p^{\mathsf{T}} = \mathrm{n}_p^{\mathrm{c}}\, \overline{\mathrm{v}}_p^{\mathrm{c}\mathsf{T}} \\ \mathrm{t}_p\, \mathrm{g}_p^{\mathsf{T}} = \left(f_p^{\mathrm{t}} - \mathrm{t}_p\, \overleftarrow{\mathrm{f}}_p^{\mathsf{T}}\right) \Big/ \left(t - \overleftarrow{t}\right) \\ \mathrm{b}_p\, \mathrm{g}_p^{\mathsf{T}} = -\mathrm{b}_p\, \overleftarrow{\mathrm{f}}_p^{\mathsf{T}} \Big/ \left(t - \overleftarrow{t}\right) \end{array}\right\} p \in \mathscr{p}^{\mathrm{s}}$
Отлипание	$\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\Sigma} = \mathbf{0},\ \mathbf{R}_0 \in \mathscr{b}_0^{\mathrm{f}}$	$\mathrm{g}_p = -\overleftarrow{\mathrm{f}}_p \Big/ \left(t - \overleftarrow{t}\right),\ \ p \in \mathscr{p}^{\mathrm{f}}$
Смешанное, $m \in \overline{0,3}$	$\left.\begin{array}{r} \mathbf{b}^k \cdot \mathbf{v} = \overline{v}'^k,\ k \in \overline{1,m} \\ \left(\mathbf{n} \cdot \dot{\boldsymbol{\Sigma}} - (\mathbf{I} - \mathbf{nn}) \cdot (\nabla \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) \cdot \boldsymbol{\Sigma}\right) \cdot \mathbf{b}^l = \overline{q}'^l, \\ l \in \overline{m+1,3} \end{array}\right\} \mathbf{R}_0 \in \mathscr{b}_0^{(m)}$	$\left.\begin{array}{r} \mathrm{b}_p^k\, \mathrm{v}_p^{\mathsf{T}} = \overline{v}_p'^k,\ k \in \overline{1,m} \\ \mathrm{b}_p^l\, \mathrm{g}_p^{\mathsf{T}} = \overline{g}_p'^l,\ l \in \overline{m+1,3} \end{array}\right\} p \in \mathscr{p}^{(m)}$

Начальные условия на макроуровне выглядят следующим образом. При $t = 0$:

$$\mathbf{r} = \mathbf{R}_0,\ \mathbf{R}_0 \in \mathscr{B}_0; \quad \nabla \cdot \boldsymbol{\Sigma} = \mathbf{0},\ \mathbf{R}_0 \in \operatorname{int} \mathscr{B}_0; \quad \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{b}^l = \overline{p}'^l,\ l \in \overline{m+1,3},\ \mathbf{R}_0 \in \mathscr{b}_0^{(m)},\ m \in \overline{0,3}.$$

Через $\{\overline{p}'^l : \mathscr{b}_0^{(m)} \to \mathbb{R}\}$ записаны поля исходных значений компонент напряжений ($l \in \overline{m+1,3}$, $m \in \overline{0,3}$).

Используемая в работе конститутивная модель материала представлена приведенной ниже системой, отнесенной к мезоуровню деформируемой заготовки. Все соотношения записаны для одного и того же произвольного кристаллита, порядковый номер $n \in \overline{1, N_{\mathrm{bc}}}$ которого в выражениях опускается ($N_{\mathrm{bc}} \in \mathbb{N}$ – общее количество кристаллитов во всей заготовке; $t \in |\mathbb{R}|$, $n \in \overline{1, N_{\mathrm{bc}}}$):

$$\dot{\mathbf{o}} = \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{o}; \quad \dot{\boldsymbol{\sigma}} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\omega} - \boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\pi} : \boldsymbol{\zeta}^{\mathrm{e}};$$

$$\boldsymbol{\omega} = \mathbf{I} \times \left(\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_1\right) : \left(\boldsymbol{\lambda} - \boldsymbol{\zeta}^{\mathrm{vp}}\right);$$

$$\boldsymbol{\zeta}^{\mathrm{e}} = \boldsymbol{\lambda} - \boldsymbol{\omega} - \boldsymbol{\zeta}^{\mathrm{vp}}; \quad \boldsymbol{\zeta}^{\mathrm{vp}} = \sum\nolimits_{m=1}^{2M} \dot{\gamma}_m \mathbf{b}_m \mathbf{n}_m;$$

$$\left.\begin{array}{l} \dot{\tau}_m^* = \sum\nolimits_{l=1}^{2N_{\mathrm{ss}}} h_{ml} \dot{\gamma}_l, \\ \dot{\gamma}_m = \dot{\gamma}^* \sqrt{\boldsymbol{\lambda} : \boldsymbol{\lambda}^{\mathsf{T}}} \left(\tau_m / \tau_m^*\right)^{\nu} \left[\!\left[\tau_m \ge \tau_m^* \right]\!\right], \\ \tau_m = \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{b}_m \mathbf{n}_m, \end{array}\right\} \ m \in \overline{1, 2N_{\mathrm{ss}}}.$$

Характеристиками состояния кристаллита являются следующие функции от времени: $\mathbf{o}:|\mathbb{R}|\to\mathbb{O}^{+}$ – ориентации ПСК, связанной с элементами симметрии решетки; $\boldsymbol{\omega},\boldsymbol{\sigma},\zeta^{\mathrm{e}},\zeta^{\mathrm{vp}},\boldsymbol{\lambda}:|\mathbb{R}|\to\mathbb{E}_3^{(2)}$ – тензоров соответственно спина ПСК, напряжений Коши, упругой и вязкопластической аддитивных составляющих меры скорости деформации, а также транспонированного градиента скорости; $\boldsymbol{\pi}:|\mathbb{R}|\to\mathbb{E}_3^{(4)}$ – тензора упругих модулей; $\{\mathbf{k}_i:|\mathbb{R}|\to\mathcal{S}\}$ – векторов ортогонального базиса ПСК; на системах скольжения краевых дислокаций ($m\in\overline{1,2N_{\mathrm{ss}}}$, где $2N_{\mathrm{ss}}\in\mathbb{N}$ – количество систем, «удвоенных» по направлению сдвига): $\{\mathbf{b}_m,\mathbf{n}_m:|\mathbb{R}|\to\mathcal{S}\}$ – векторов Бюргерса и нормалей к плоскостям скольжения; $\{\dot{\gamma}_m:|\mathbb{R}|\to|\mathbb{R}|\}$ – текущих скоростей сдвигов; $\{\tau_m,\tau_m^{*}:|\mathbb{R}|\to\mathbb{R}\}$ – текущих и критических касательных напряжений. В качестве постоянных принимаются: $\dot{\gamma}^{*}\in|\mathbb{R}|$ – относительная базовая скорость сдвига; $\{h_{ml}\in|\mathbb{R}|\}$ – коэффициенты упрочнения ($m,l\in 2N_{\mathrm{ss}}$); $\nu\in|\mathbb{R}|$ – параметр скоростной чувствительности. Здесь и далее c обозначает индикатор логического выражения c, равный 1 в случае, когда оно выполняется, и 0 – если нет.

Начальные условия на мезоуровне имеют следующий вид ($t=0$, $n\in\overline{1,N_{\mathrm{bc}}}$):

$$\mathbf{o}=\mathbf{o}_0;\quad \boldsymbol{\sigma}=\mathbf{0};\quad \tau_m^{*}=\tau_{m0}^{*},\ m\in\overline{1,2N_{\mathrm{ss}}}.$$

В записанных равенствах: $\mathbf{o}_0$ – исходная ориентация кристаллита; $\{\tau_{h0}^{*}\in|\mathbb{R}|\}$ – начальные значения критических касательных напряжений на системах скольжения ($m\in\overline{1,2N_{\mathrm{ss}}}$).

Реализация связей между масштабными уровнями задачи предполагает передачу воздействий в каждый из кристаллитов и осреднение их откликов по соответствующим агрегатам, назначенным материальным точкам. Указанные процедуры осуществляются в предположении расширенной гипотезы Фойгта об однородности градиента скорости деформации в пределах любого отдельно взятого макроскопического представительного объема. На рисунке 1 приведена схема организации вычислений в используемой модели поликристаллического материала. Для функций $\{\mathbf{x}_n:|\mathbb{R}|\to\mathbb{E}_3^{(R)}\}$, где $R\in\mathbb{N}$, описывающих изменение во времени некоторой характеристики кристаллитов с объемами $\{v_n\in\mathbb{R}^{+}\}$, операция осреднения формально определяет поле $\langle\mathbf{x}\rangle:|\mathbb{R}|\times\mathcal{B}_0\to\mathbb{E}_3^{(R)}$ ее макроскопического эффективного аналога и функции $\{\vartriangle\mathbf{x}_n:|\mathbb{R}|\to\mathbb{E}_3^{(R)}\}$ отклонений от среднего ($n\in\overline{1,N_{\mathrm{c}}}$):

$$\langle\mathbf{x}\rangle(t,\mathbf{R}_0)=\sum_{n\in\mathcal{N}(\mathbf{R}_0)}v_n\mathbf{x}_n(t)\Big/\sum_{n\in\mathcal{N}(\mathbf{R}_0)}v_n;\quad \vartriangle\mathbf{x}_n(t)=\mathbf{x}_n(t)-\langle\mathbf{x}\rangle(t,\mathbf{R}_0),\ n\in\mathcal{N}(\mathbf{R}_0).$$

Под $\mathcal{N}(\mathbf{R}_0)\subset\overline{1,N_{\mathrm{bc}}}$ понимается множество номеров кристаллитов, формирующих агрегат в материальной точке $\mathbf{R}_0\in\mathcal{B}_0$.

Расчет деформирования начально текстурированных материалов предполагает предварительную генерацию выборки случайных ориентаций $\{\mathbf{o}_0^{(n)}\}$, статистически воспроизводящую известные сведения об исходном ПМРО ($n\in\overline{1,N}$). В той ситуации, когда указанные сведения предоставляются на полюсных фигурах, для этой цели могут быть применены предлагаемые в работе алгоритмы типа Монте-Карло. Сформулированный подход опирается на вероятностную интерпретацию так называемого фундаментального уравнения текстурного анализа. Для набора прямых полюсных плотностей $\{d^{(k)}:\mathcal{S}\to|\mathbb{R}|\}$, вычисляемых по соответствующим фигурам плоскостей с векторами $\{\mathbf{k}^{(k)}\in\mathcal{S}\}$ нормалей, упомянутое уравнение реализуется в виде ($k\in\overline{1,K}$, где $K\in\mathbb{N}$ – количество плотностей/фигур):

$$d^{(k)}(\mathbf{l}) = \frac{1}{2}\Big(\big(\mathrm{R}\,\phi\big)(\mathbf{k}^{(k)},\mathbf{l}) + \big(\mathrm{R}\,\phi\big)(-\mathbf{k}^{(k)},\mathbf{l})\Big)$$

Здесь $\mathrm{R}\,\phi : \mathcal{S}^2 \to |\mathbb{R}|$ есть функция распределения направлений (ФРН), значение $\big(\mathrm{R}\,\phi\big)(\mathbf{k},\mathbf{l})$ которой на конкретных векторах $\mathbf{k},\mathbf{l} \in \mathcal{S}$, определенных соответственно в ПСК решетки (в данном случае – жестко связанной с кристаллографической) и ЛСК, понимается как величина плотности вероятности их совпадения. Указанная ФРН может быть распознана как образ искомой ФРО ϕ при сферическом преобразовании Радона ($\mathbf{k},\mathbf{l} \in \mathcal{S}$):

$$8\pi^2\big(\mathrm{R}\,\phi\big)(\mathbf{k},\mathbf{l}) = \int_0^{2\pi} \phi\big(\mathbf{R}(\mathbf{k},\mathbf{l}) \cdot \mathbf{R}(\alpha,\mathbf{k})\big)\,\mathrm{d}\,\alpha = \int_0^{2\pi} \phi\big(\mathbf{R}(\alpha,\mathbf{l}) \cdot \mathbf{R}(\mathbf{k},\mathbf{l})\big)\,\mathrm{d}\,\alpha,$$

где тензор $\mathbf{R}(\alpha,\mathbf{k}) \in \mathbb{O}^+$ задает поворот вокруг $\mathbf{k}$ на угол $\alpha \in [0, 2\pi)$, а тензор $\mathbf{R}(\mathbf{k},\mathbf{l}) \in \mathbb{O}^+$ – поворот от $\mathbf{k}$ к $\mathbf{l}$ в содержащей их плоскости.

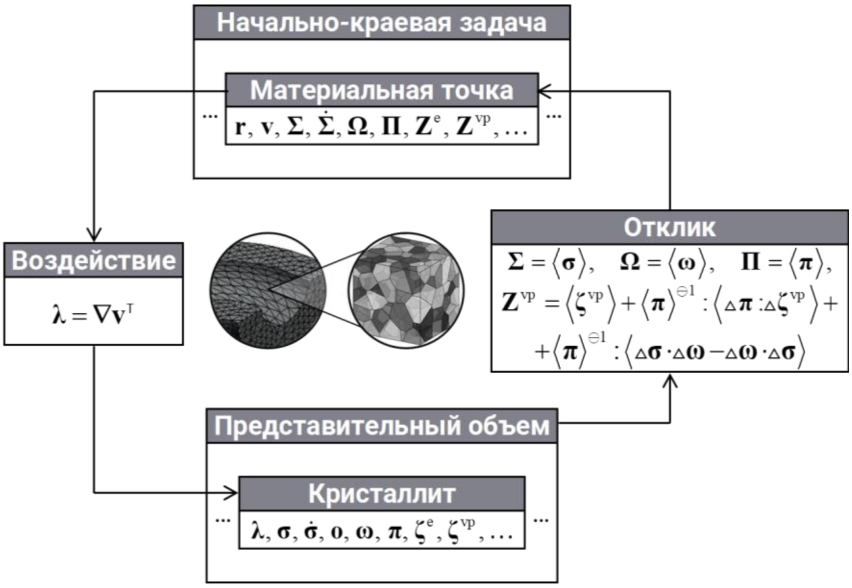

Рисунок 1. Взаимосвязь масштабных уровней в модели поликристаллического материала

Аппроксимируя записанные выше соотношения в одном классе ФРО, можно перейти к следующей задаче квадратичной минимизации, эквивалентной исходной в специальном предельном смысле. Для предварительно сгенерированных реализаций $\{\mathbf{o}_m\}$ равномерно распределенной случайной ориентации ($m \in \overline{1,M}$, где M – размер используемой выборки) требуется найти такую вектор-строку $\hat{\upphi}^{\mathrm{e}} = (\hat{\upphi}^{\mathrm{e}}_1, \ldots, \hat{\upphi}^{\mathrm{e}}_M) \in |\mathbb{R}|^M$, что:

$$\tilde{\mathrm{Q}}^{\mathrm{e}}(\hat{\upphi}^{\mathrm{e}}) = \min_{\upphi \in |\mathbb{R}|^M} \tilde{\mathrm{Q}}^{\mathrm{e}}(\upphi); \quad \tilde{\mathrm{Q}}^{\mathrm{e}}(\upphi) = M^{-1}\big(1 - \cos\varepsilon\big)^{-1} \upphi\, \tilde{\mathrm{D}}^{\mathrm{T}}\, \tilde{\mathrm{D}}\, \upphi^{\mathrm{T}} - 2\,\tilde{\mathrm{d}}\, \tilde{\mathrm{D}}\, \upphi^{\mathrm{T}}.$$

Здесь $\tilde{\mathrm{D}} \in \{0,1\}^M_{KM}$ и $\tilde{\mathrm{d}} \in |\mathbb{R}|^{KM}$ – реализации случайных матрицы и вектор-строки, определенные по правилам:

$$\tilde{\mathrm{D}}^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} \tilde{D}^{(1)}_{11} & \cdots & \tilde{D}^{(1)}_{M1} & \cdots & \tilde{D}^{(K)}_{11} & \cdots & \tilde{D}^{(K)}_{M1} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \tilde{D}^{(1)}_{1M} & \cdots & \tilde{D}^{(1)}_{MM} & \cdots & \tilde{D}^{(K)}_{1M} & \cdots & \tilde{D}^{(K)}_{MM} \end{bmatrix}; \quad \begin{aligned} &\tilde{\mathrm{d}} = \Big(\tilde{d}^{(1)}_1 \;\; \cdots \;\; \tilde{d}^{(1)}_M \;\; \cdots \;\; \tilde{d}^{(K)}_1 \;\; \cdots \;\; \tilde{d}^{(K)}_M\Big); \\ &\tilde{D}^{(k)}_{lm} = \Big[\!\!\Big[\big|\mathbf{k}^{(k)} \cdot \mathbf{o}^{\mathrm{T}}_l \cdot \mathbf{o}_m \cdot \mathbf{k}^{(k)}\big| > \cos\varepsilon \Big]\!\!\Big], \\ &\tilde{d}^{(k)}_l = d^{(k)}(\mathbf{o}_l \cdot \mathbf{k}^{(k)}), \;\; k \in \overline{1,K}, \;\; l,m \in \overline{1,M}. \end{aligned}$$

Параметр $\varepsilon \in |\mathbb{R}|$ полагается малым числом, связываемым с неточностью вычислений $\{d^{(k)}\}$. Полученные в качестве решения приведенной задачи $\{\hat{\upphi}^{\mathrm{e}}_m\}$ следует воспринимать как оценки соответствующих значений $\{\phi(\mathbf{o}_m)\}$. Пары $\{(\mathbf{o}_m, \hat{\phi}^{\mathrm{e}}_m) \in \mathbb{O}^+ \times |\mathbb{R}|\}$ формируют вспомогательную выборку, из которой случайным весовым отбором извлекается подвыборка ориентаций $\{\mathbf{o}_{i_n}\}$ с близким к требуемому распределением ($n \in \overline{1,N}$). Обозначенная процедура предполагает генерацию индексов $\{i_n \in \overline{1,M}\}$ как независимых повторных реализаций случайной величины $I : \Omega \to \overline{1,M}$, заданной вероятностями ($m \in \overline{1,M}$):

$$\Pr(I = m) = \hat{\phi}^{\mathrm{e}}_m \Big/ \sum\nolimits_{p=1}^{M} \hat{\phi}^{\mathrm{e}}_p,$$

где Ω – множество случайных элементарных событий, $\mathcal{W}$ – сигма-алгебра его подмножеств, $\Pr : \mathcal{W} \to [0,1]$ – мера вероятности.

Изложенный подход несложно переформулировать на случай, когда заданными являются обратные полюсные фигуры или некоторая комбинация из прямых и обратных. Возможный результат подобного применения, полученный с помощью разработанных программных средств [13], проиллюстрирован на рисунке 2. Изображающие точки ориентаций в усеченном кубе соответствуют координатам векторов Родрига, спроецированным на фундаментальную область для группы симметрии кубической решетки. Детальному описанию представленной выше методики с примерами использования и доказательствами сопутствующих утверждений посвящена статья [11].

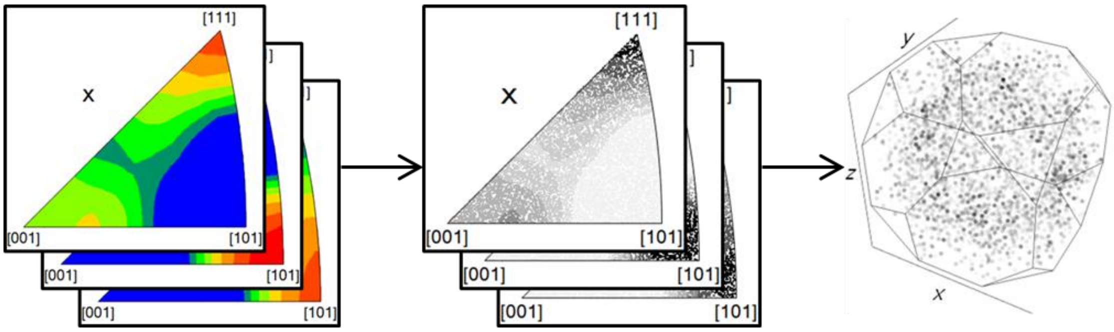

Рисунок 2. Пример построения вспомогательной выборки по обратным полюсным фигурам. Результат – 10 000 равномерно распределенных ориентаций, взвешенных с оцененными вероятностями реализации

В **третьей главе** предлагается способ построения пространства текстурных параметров для редуцированного представления ПМРО. Потребность в таком пространстве обусловлена необходимостью конкретизации постановок F- и T-подзадач для последующей вычислительной реализации. Моделирование конкретного режима деформирования заготовки предоставляет сведения о получаемых в ее объеме текстурах в виде выборок ориентаций для различных материальных областей. На этапе решения T-подзадачи совокупности таких областей проецируются на конфигурацию изделия, используемую при рассмотрении F-подзадачи, где соответствующие им выборки сопоставляются с требуемой МРО. Установление данной МРО в численных процедурах невозможно без ее параметризации, причем особый интерес вызывает получение пространства возможных параметров наименьшей размерности, обеспечивающей удовлетворительную точность воспроизведения реальных текстур. Существуют различные способы редуцирования ФРО, которые можно условно разделить на три группы подходов: 1) разложения в ряды Фурье; 2) аппроксимации текстурных компонент; 3) явные дискретизации ориентационного пространства. Относящиеся к ним приемы упоминаются во второй главе в контексте проблемы обращения полюсных фигур, для решения которой они широко используются на практике. Некоторые альтернативные приложения, значимые с точки зрения конкретно данной работы, представлены в публикациях S. Acharjee, B.L. Adams, R. Arnold, P. Crout, P.R. Dawson, A.S. Eggeman, S. Ganapathysubramanian, H. Garmestani, A. Henrie, B. Henrie, J.R. Houskamp, D.N. Johnstone, P. Jupp, S.R. Kalidindi, A. Kumar, M. Lyon, B.H. Martineau, P.A. Midgley, G. Proust, D. Raabe, F. Roters, H. Schaeben, V. Sundararaghavan, N. Zabaras, В.Н. Милича, С.М. Мокровой, Р.П. Петрова и других.

Решение F-подзадачи предлагается искать в виде ПМРО Φ на $\mathscr{P}$ (конфигурации изделия), однородного в пределах конфигураций $\{\mathscr{P}^{(s)} \subset \mathscr{P}\}$ некоторых материальных подобластей, называемых контрольными (КМП; $s \in \overline{1, N_{\mathrm{cs}}}$, где $N_{\mathrm{cs}} \in \mathbb{N}$ – их количество): $\bigcup_{s=1}^{N_{\mathrm{cs}}} \mathscr{P}^{(s)} = \mathscr{P}$, $V(\mathscr{P}^{(s)} \bigcap \mathscr{P}^{(t)}) = 0$ при $s, t \in \overline{1, N_{\mathrm{cs}}}$ и $s \neq t$; $V : \mathcal{E}^{\mathrm{cl}} \to |\mathbb{R}|$ – мера объема в $\mathbb{E}_3$. Значениями Φ на КМП, в свою очередь, полагаются параметризованные МРО $\{\Phi^{(s)}(\varphi^{(s)})\}$ простого вида, например ($s \in \overline{1, N_{\mathrm{cr}}}$, $\mathscr{O} \in \mathcal{O}^{+}$):

$$\Phi^{(s)}(\varphi^{(s)}, \mathscr{O}) = \sum_{m=1}^{N_{\mathrm{om}}^{(s)}} \varphi_m^{(s)} \left[\!\left[\mathbf{o}_m^{(s)} \in \mathscr{O} \right]\!\right].$$

Здесь $\{\varphi^{(s)} = (\varphi_1^{(s)}, \ldots, \varphi_{N_{\mathrm{om}}^{(s)}}^{(s)}) \in |\mathbb{R}|^{N_{\mathrm{om}}^{(s)}}\}$ – вектор-строки параметров; $\{\mathbf{o}_m^{(s)} \in \mathbb{O}^{+}\}$ – возможные преимущественные ориентации внутри КМП, характерные для рассматриваемого процесса деформирования заготовки ($m \in \overline{1, N_{\mathrm{om}}^{(s)}}$, где $\{N_{\mathrm{om}}^{(s)} \in \mathbb{N}\}$ – количества таких «ориентационных мод»; $s \in \overline{1, N_{\mathrm{cr}}}$). Выражение в правой части записанного равенства представляет собой взвешенную сумму мер Дирака, сосредоточенных в соответствующих $\{\mathbf{o}_m^{(s)}\}$. Это предельный случай локализации в ориентационном пространстве компонент, на которые «раскладывается» текстура в КМП. Искомые ПМРО можно параметризовать «расширенной» вектор-строкой $\varphi = (\varphi^{(1)}, \ldots, \varphi^{(N_{\mathrm{cs}})}) \in |\mathbb{R}|^{N_{\mathrm{fv}}}$ в виде $\Phi(\varphi)$ ($N_{\mathrm{fv}} = \sum_{s=1}^{N_{\mathrm{cs}}} N_{\mathrm{om}}^{(s)}$ – общая размерность F-подзадачи; $s \in \overline{1, N_{\mathrm{cs}}}$, $\mathbf{R}_0 \in \mathscr{P}$, $\mathscr{O} \in \mathcal{O}^{+}$):

$$\Phi(\varphi, \mathbf{R}_0, \mathscr{O}) = \sum_{s=1}^{N_{\mathrm{cr}}} \Phi^{(s)}(\varphi^{(s)}, \mathscr{O}) \left[\!\left[\mathbf{R}_0 \in \mathscr{P}^{(s)} \right]\!\right].$$

Из условий неотрицательности и нормировки МРО при этом следует, что

$$\varphi_m^{(s)} \geq 0, \ \sum_{m=1}^{N_{\mathrm{om}}^{(s)}} \varphi_m^{(s)} = 1, \ m \in \overline{1, N_{\mathrm{om}}^{(s)}} \ \ s \in \overline{1, N_{\mathrm{cs}}}.$$

Приведенными соотношениями определяется множество $\mathscr{f} \subset |\mathbb{R}|^{N_{\mathrm{fv}}}$ вектор-строк так называемых текстурных параметров (ВСТП). Всевозможные ПМРО, конкретизируемые ими, формируют $\mathscr{F}$ (множество параметризованных ПМРО), на котором строится решение F-подзадачи. Ее целевой критерий и ограничения с использованием указанного соответствия могут быть переписаны в виде функций $f_0 = \mathscr{f} \to \mathbb{R}$ и $\{f_c : \mathscr{f} \to \mathbb{R}\}$ ($c \in \overline{1, N_{\mathrm{fc}}}$):

$$f_0(\varphi) = F_0(\Phi(\varphi)); \quad f_c(\varphi) = F_c(\Phi(\varphi)), \ c \in \overline{1, N_{\mathrm{fc}}}.$$

Теперь задача состоит в поиске такой ВСТП $\hat{\varphi} \in \mathscr{f}$, что

$$f_0(\hat{\varphi}) = \min\nolimits_{\varphi \in \mathscr{f}} f_0(\varphi); \quad f_c(\hat{\varphi}) \leq 0, \ c \in \overline{1, N_{\mathrm{fc}}}.$$

Для ее решения применимы стандартные методы численной оптимизации функций нескольких переменных.

Обозначенные выше $\{\mathbf{o}_m^{(s)}\}$ следует воспринимать как положения текстурных компонент, интенсифицируемых в некоторых допустимых реализациях процесса деформирования из Т-подзадачи. В общем случае информация о них может отсутствовать и тогда должна быть получена в ходе решения ЗФОП. Для этой цели предлагается привлечение специализированных методов кластерного анализа. В каждой выборке ориентаций из КМП, получаемой при моделировании того или иного режима, устанавливаются непересекающиеся подмножества – кластеры, элементы которых являются в определенном смысле близкими между собой. Условные центры таких кластеров ассоциируются с положениями текстурных компонент, а суммарная объемная доля кристаллитов с принадлежащими им ориентациями – с интенсивностями. Понятие близости формализуется введением псевдометрического расстояния $\mu : \mathbb{O}^{+2} \to |\mathbb{R}|$, инвариантного относительно преобразований $\mathbb{S}^{+} \subset \mathbb{O}^{+}$ поворотной группы симметрии кристаллической решетки (приводимое ниже выражение ориентировано на вычислительную реализацию с использованием кватернионов):

$$\mu\left(\mathbf{R}(2\alpha,\mathbf{u}),\mathbf{R}(2\beta,\mathbf{v})\right) = 2\min_{\mathbf{R}(2\gamma,\mathbf{w})\in\mathbb{S}^{+}} \arccos\left|\cos\gamma\left(\cos\alpha\cos\beta+\sin\alpha\sin\beta\mathbf{u}\cdot\mathbf{v}\right)-\right.$$
$$\left.-\sin\gamma\mathbf{w}\cdot\left(\sin\alpha\cos\beta\mathbf{u}-\cos\alpha\sin\beta\mathbf{v}+\sin\alpha\sin\beta\mathbf{u}\times\mathbf{v}\right)\right|.$$

Данное расстояние индуцируется естественной римановой метрикой; геометрическим смыслом величины $\mu(\mathbf{o},\mathbf{p}) \in |\mathbb{R}|^{+}$ для ориентаций $\mathbf{o},\mathbf{p} \in \mathbb{O}^{+}$ является наименьший угол поворота, связывающего $\mathbf{o}$ с ориентацией, симметрически эквивалентной $\mathbf{p}$. Роль условного центра в каждом кластере играет медоид – такой элемент множества, среднее расстояние от которого до других элементов того же множества минимально. Следует заметить, что в общем случае речь здесь должна идти о среднем взвешенном значении, поскольку объемы кристаллитов, отвечающих ориентациям в анализируемой выборке, могут отличаться. Расстояния между всевозможными парами ее элементов группируются в так называемую матрицу разориентации. Подобного объекта уже оказывается достаточно для применения широкого класса методов кластерного анализа абстрактных данных. В разработанных процедурах предварительно построенная матрица разориентации используется совместно с опциональными весовыми коэффициентами при ориентациях, выражающими объемные доли соответствующих кристаллитов.

Основной алгоритм кластеризации реализуется в несколько логически отделимых друг от друга стадий и начинается с разбиения заданной выборки на слои. Каждый слой формируется путем объединения содержимого псевдометрических окрестностей ориентаций с наибольшей плотностью распределения – тех, в которых содержится достаточно большое число других ориентаций. Получаемое в результате множество исключается из выборки, после чего описанный этап начинается заново. Целью такого расслоения является преодоление проблемы чувствительности классических кластеризующих схем к «шуму» из разреженных элементов.

Следующей стадией является пре-кластеризация «по достижимости». Ориентации каждого отдельно взятого слоя рассматриваются как вершины графа, наличию ребер в котором отвечают близости ориентаций с точки зрения используемого псевдометрического расстояния. Максимальные связные компоненты данного графа трактуются как кластеры начального приближения. Примечательно, что выделение таких компонент может быть проведено непосредственно по матрице разориентации.

Медоидная пост-кластеризация представляет собой итерационную процедуру, направленную на уточнение первичного разбиения и одновременное установление простейших статистических характеристик локальных распределений ориентаций. Конкретно на этой стадии количество кластеров фиксируется; в каждом из них определяется медоид, после чего все ориентации в пределах одного слоя переназначаются кластерам с ближайшими полученными медоидами. Эти операции повторяются до тех пор, пока не перестает убывать суммарное взвешенное псевдометрическое отклонение ориентаций от соответствующих им медоидов. Приведенную схему можно трактовать как эвристическую стратегию дискретной минимизации для следующей задачи. Пусть рассматриваемый слой содержит ориентации $\{\mathbf{o}_n \in \mathbb{O}^{+}\}$, которым отвечают объемные доли $\{\phi_n \in [0,1]\}$ кристаллитов: $\sum_{n=1}^{N}\phi_n = 1$ ($n \in \overline{1,N}$, где $N \in \mathbb{N}$ – количество ориентаций на слое). Необходимо найти матрицу $\hat{\mathrm{b}} \in \mathscr{B} = \{0,1\}_N^K$ принадлежности ориентаций к кластерам и вектор-строку $\hat{\mathrm{m}} \in \mathscr{M} = \overline{1,N}^K$ номеров ориентаций-медоидов ($k \in \overline{1,K}$, где $K \in \mathbb{N}$ – зафиксированное количество кластеров), такие что

$$\mathrm{D}(\hat{\mathrm{b}},\hat{\mathrm{m}}) = \min_{(\mathrm{b},\mathrm{m})\in\mathscr{B}\times\mathscr{M}} \mathrm{D}(\mathrm{b},\mathrm{m});\ \ \mathrm{D}(\mathrm{b},\mathrm{m}) = \sum_{n=1}^{N}\phi_n\sum_{k=1}^{K}b_{nk}M_{m_k n}.$$

По определению, $b_{nk}=1$ тогда и только тогда, когда проиндексированная $n\in\overline{1,N}$ ориентация принадлежит кластеру с номером $k\in\overline{1,K}$ (в противном случае – $b_{nk}=0$). Через $\{M_{np}=\mu(\mathbf{o}_n,\mathbf{o}_p)\in|\mathbb{R}|\}$ обозначены компоненты блока матрицы разориентации рассматриваемого слоя ($n, p\in\overline{1,N}$).

Опциональной стадией является операция расщепления кластеров, позволяющая контролировать степень их локализации в ориентационном пространстве. На каждом слое медоид кластера с наибольшим средневзвешенным псевдометрическим отклонением заменяется парой его ориентаций, подходящих на роль медоидов в новом разбиении. В сформулированном варианте алгоритма данные элементы выбираются как обладающие наибольшим произведением расстояния между ними на весовые коэффициенты. Обозначенный этап предполагает последующее проведение медоидной пост-кластеризации, в итерации которой, таким образом, он может быть включен непосредственно.

На рисунке 3 изображен результат применения реализованной основной процедуры [10] к выборке из 1000 ориентаций, полученной при моделировании сложного нагружения поликристаллического агрегата меди. Визуализированы медоиды всех слоев, за исключением последнего, содержащего вырожденные (одноэлементные) кластеры. Подробному теоретическому изложению представленной методики и некоторым примерам ее использования посвящены статьи [4, 9]; конкретные приложения рассмотрены в публикациях [5–7].

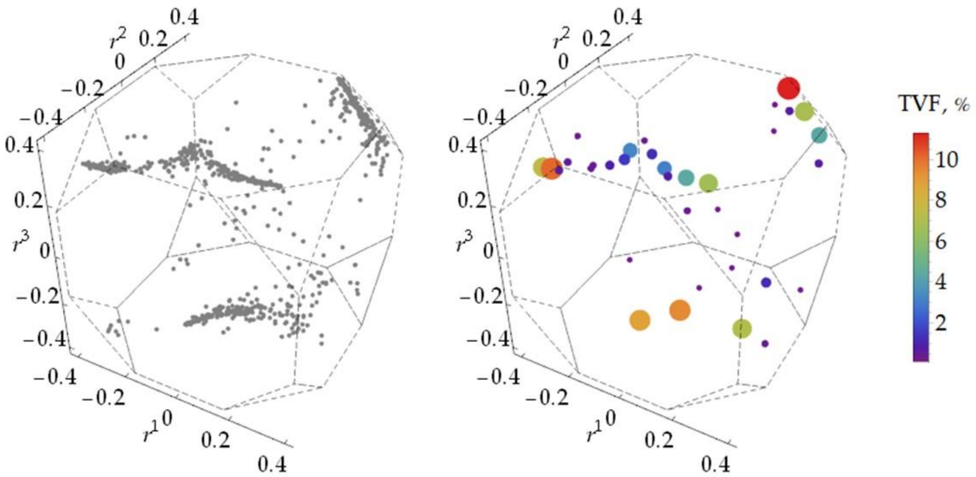

Рисунок 3. Пример послойной симметрийно-инвариантной кластеризации выборки из 1 000 ориентаций. Результат – набор медоидов, взвешенных с суммарной объемной долей (TVF) кристаллитов, имеющих близкие ориентации

Разработанный аппарат кластерного анализа дает возможность конкретизировать $\{\mathbf{o}_m^{(s)}\}$ во введенной выше параметризации ПМРО. Для этого в каждой КМП медоиды верхних слоев (характеризуемые наибольшей интенсивностью соответствующих текстурных компонент) объединяются по всем своим реализациям для некоторой выборки допустимых режимов деформирования, также называемых опорными. После устранения близких элементов в получаемом наборе (также на основе кластеризации) остаются точки, адаптированно дискретизирующие ориентационное пространство заданной КМП. Следует заметить, что в общем случае в их число целесообразно включение и других элементов, повышающих точность редуцированного воспроизведения МРО.

Конкретизации постановки Т-подзадачи предполагает указание правила, по которому в ВСТП будут преобразовываться выборки ориентаций, получаемые в расчетах конкретных режимов. Наиболее простым подходом является вычисление суммарной объемной доли кристаллитов, расположенных в ориентационных пространствах КМП внутри центрированных на текстурных компонентах многогранников Вороного (ключевая особенность подобных множеств состоит в относительно легкой проверке принадлежности). В этом случае компоненты ВСТП $\varphi(\tau) \in \mathscr{f}$ для режима, задаваемого ВСУП $\tau \in \mathscr{T}$, определяются по формуле:

$$\varphi_m^{(s)}(\tau) = \sum\nolimits_{n \in \mathscr{K}^{(s)}} v_n \left[\!\left[\mathbf{o}_n(\tau) = \min\nolimits_{p \in \mathscr{K}^{(s)}} \mu(\mathbf{o}_p(\tau), \mathbf{o}_m^{(s)}) \right]\!\right] \Big/ \sum\nolimits_{n \in \mathscr{K}^{(s)}} v_n, \quad m \in \overline{1, N_{\mathrm{om}}^{(s)}}, \ s \in \overline{1, N_{\mathrm{cr}}}.$$

Здесь $\{\mathbf{o}_n(\tau)\}$ – реализуемые в объеме изделия ориентации кристаллитов ($n \in \overline{1, N_{\mathrm{pc}}}$, где $N_{\mathrm{pc}} \in \mathbb{N}$ – их количество: $N_{\mathrm{pc}} \le N_{\mathrm{tc}}$); $\{\mathscr{K}^{(s)} \subset \overline{1, N_{\mathrm{pc}}}\}$ – множества номеров кристаллитов, приходящихся на рассматриваемые КМП ($s \in \overline{1, N_{\mathrm{cr}}}$).

Уточненная формулировка Т-подзадачи с использованием введенных выше определений предполагает установление ВСУП $\hat{\tau} \in \mathscr{T}$, для которой

$$t_0(\varphi(\hat{\tau}), \hat{\varphi}) = \min\nolimits_{\tau \in \mathscr{T}} t_0(\varphi(\tau), \hat{\varphi}); \quad T_c(\hat{\tau}) \le 0, \ c \in \overline{1, N_{\mathrm{tc}}};$$

где $t_0 : \mathscr{f}^2 \to |\mathbb{R}|$ – мера близости ВСТП. Эту меру предлагается строить на основе выпуклой квадратичной аппроксимации целевого критерия F-подзадачи в окрестности точки минимума. Такой подход позволяет учесть неодинаковый вклад различных текстурных параметров (компонент ВСТП) в оптимальность функционирования изделия. Более подробно, в качестве определения t_0 принимается равенство:

$$t_0(\varphi(\tau), \hat{\varphi}) = \left(\varphi(\tau) - \hat{\varphi}\right) \hat{\mathrm{H}} \left(\varphi(\tau) - \hat{\varphi}\right)^{\mathrm{T}},$$

где $\hat{\mathrm{H}} \in \mathbb{R}_{N_{\mathrm{f\,v}}}^{N_{\mathrm{f\,v}}}$ – приближенный аналог матрицы Гессе для f_0, вычисленной в $\hat{\varphi}$, то есть некоторая симметричная положительно полуопределенная матрица. Установление ее компонент производится в рамках метода наименьших квадратов с использованием заданной выборки допустимых ВСТП $\{\hat{\varphi}_p \in \mathscr{f}\}$ из окрестности $\hat{\varphi}$ ($p \in \overline{1, P}$, где $P \in \mathbb{N}$ – объем выборки). Соответствующую оптимизационную задачу в рассматриваемом случае удобно свести (с применением спектрального разложения и экспоненциального отображения) к поиску таких матрицы $\hat{\mathrm{A}} \in \mathbb{R}_{N_{\mathrm{f\,v}}}^{N_{\mathrm{f\,v}}}$ и вектор-строки $\hat{\mathrm{h}} \in \mathbb{R}^{N_{\mathrm{f\,v}}}$, что

$$\mathrm{F}(\hat{\mathrm{H}}) = \min\nolimits_{\mathrm{H} \in \mathbb{R}_{N_{\mathrm{f\,v}}}^{N_{\mathrm{f\,v}}}} \mathrm{F}(\mathrm{H}); \quad \mathrm{F}(\mathrm{H}) = \sum\nolimits_{p=1}^{P} \left(\left(\hat{\varphi}_p - \hat{\varphi}\right) \mathrm{H} \left(\hat{\varphi}_p - \hat{\varphi}\right)^{\mathrm{T}} - 2\left(f_0(\hat{\varphi}_p) - f_0(\hat{\varphi}) \right) \right)^2;$$

$$\hat{\mathrm{H}} = \exp \hat{\mathrm{A}} \operatorname{diag} \hat{\mathrm{h}} \exp \hat{\mathrm{A}}^{\mathrm{T}}; \quad \hat{\mathrm{A}}^{\mathrm{T}} = -\hat{\mathrm{A}}; \quad \hat{\mathrm{h}} \ge 0.$$

Требуемая здесь допустимость $\{\hat{\varphi}_p\}$ выражается в выполнении ограничений F-подзадачи, то есть ($c \in \overline{1, N_{\mathrm{f\,c}}}$, $p \in \overline{1, P}$):

$$f_c(\hat{\varphi}_p) \le 0.$$

Некоторые наработки в области способов конкретизации постановки ЗФОП представлены в публикации [8].

Четвертая глава описывает структуру алгоритма, предлагаемого для решения сформулированной ЗФОП. Приводится поэтапный разбор его реализации на простом демонстрационном примере, в котором исследовалось модельное приближение процесса равноканального углового прессования для получения материала с наименьшей упругой податливостью на растяжение/сжатие в фиксированном направлении. Процесс деформирования заготовки включал в себя два прохода прессования с прямым углом сочленения каналов. Его режимы конкретизировались варьируемым углом $\alpha \in [0, 180°]$ поворота заготовки вокруг оси входного канала перед вторым проходом, что отвечает однокомпонентной ВСУП в Т-подзадаче. Изделие рассматривалось как единая КМП, соответствующая представительному объему поликристалла меди.

На рисунке 4 изображены ключевые стадии процедуры решения ЗФОП, содержание которых более подробно определено в изложенных выше фрагментах работы. Самым первым шагом является моделирование опорных режимов, в общем случае состоящее в проведении серии прямых расчетов начально-краевых задач, описывающих выборочные допустимые реализации процесса деформирования заготовки. Осуществление этого этапа преследует две цели: во-первых, получение начальных приближений минимизирующих последовательностей T-подзадачи; во-вторых, установление текстурных компонент, характерных для исследуемого процесса. На основе информации о таких компонентах строится адаптированное пространство текстурных параметров, в редуцированном виде представляющих реализуемые в изделии ПМРО. В терминах отвечающих им ВСТП для последующего решения переопределяются целевые критерии и ограничения F- и T-подзадачи.

Рисунок 5 показывает соответствие между критериями оптимизационных подзадач для демонстрационного примера ЗФОП. Кривая для полной модели F-подзадачи строится путем вычисления эффективной податливости рассматриваемого поликристаллического материала через осреднение всей выборки его ориентаций. В случае редуцированной модели данная выборка предварительно конвертируется в ВСТП по предложенной в работе формуле. Оставшаяся кривая изображает рельеф функции, минимизируемой в ходе решения T-подзадачи. Для получения корректного результата в ЗФОП необходимо, чтобы точки минимумов указанных критериев коррелировали.

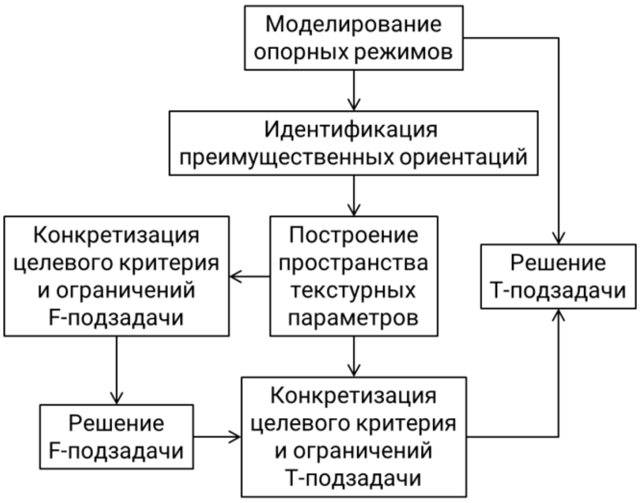

Рисунок 4. Схема последовательной реализации этапов решения ЗФОП

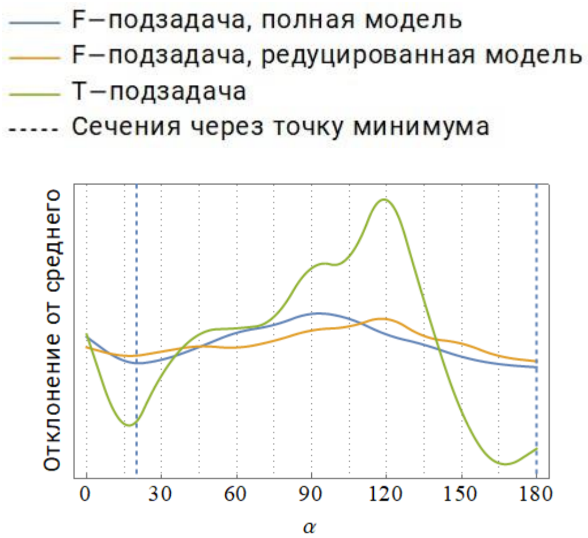

Рисунок 5. Значения целевых критериев для различных режимов деформирования в демонстрационном примере ЗФОП

В **заключении** перечислены основные результаты диссертационной работы и выводы. Резюмируя: предложена вычислительная методика для проектирования рационально текстурированных поликристаллических изделий и определения способов их получения методами интенсивной неупругой деформации; создан прикладной программный комплекс, позволяющий моделировать реальные технологические операции с учетом эволюции внутренней структуры деформируемого материала, в том числе кристаллографической текстуры, а также решать обозначенные ЗФОП.

ОСНОВНЫЕ ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. **Остапович К.В.**, Трусов П.В. Об анизотропии упругих материалов:идентификация симметрийных свойств // Механика композиционных материалов и конструкций. – 2016. – Т. 22. – № 1. – С. 69–84. **ВАК**

2. Trusov P.V., **Ostapovich K.V.** On elastic symmetry identification for polycrystalline materials // Symmetry. – 2017. –V. 9. – № 10. – 240. – Pp.1-28. **WoS**

3. Trusov P.V., **Ostapovich K.V.** On the symmetry identification for the multi-level models of polycrystalline materials // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. – 2017. – V. 286. – 012032. **Scopus**

4. **Остапович К.В.**, Трусов П.В. Исследование кристаллографических текстур при многоуровневом моделировании деформирования поликристаллов с помощью методов кластерного анализа // Вычислительная механика сплошных сред. – 2019. – Т. 12. – №1. – С. 67–79. **ВАК**

5. **Ostapovich K.V.**, Trusov P.V., Yanz A.Yu. An algorithm for identifying texture components in the framework of statistical crystal plasticity models // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. – 2019. – V. 581. – 012014. Scopus

6. **Ostapovich K.V.**, Trusov P.V. An application of clustering techniques to reducing crystallographic texture data. // AIP Conference Proceedings. – 2020. – V. 2216. – 070003. **Scopus**, **WoS**

7. **Остапович К.В.**, Трусов П.В., Янц А.Ю. Прогнозирование образования кристаллографических текстур при интенсивном неупругом деформировании поликристаллических образцов на основе двухуровневой статистической упруговязкопластической модели // Физическая мезомеханика. – 2020. – Т. 23, № 5. – С. 20-33. **ВАК**

= **Ostapovich K.V.**, Trusov P.V., and Yants A.Yu. Prediction of crystallographic texture formation in polycrystalline samples under severe plastic deformation based on a two-level statistical elasto-viscoplastic model // Physical Mesomechanics. – 2021. – Vol. 24, No. 3. – P. 225-236. **Scopus**, **WoS**

8. **Ostapovich K.V.**, Trusov P.V. Determination of deformation regimes for obtaining polycrystalline materials with rational textures by using multilevel inelasticity models // AIP Conference Proceedings. – 2020. – V. 2310. – 020236. **Scopus**, **WoS**

9. **Ostapovich K.V.**, Trusov P.V. Reduced Statistical Representation of Crystallographic Textures Based on Symmetry-Invariant Clustering of Lattice Orientations // Crystals. – 2021. – V.11. – 336. **WoS**

10. Трусов П.В., **Остапович К.В.** Программный модуль для послойной кластеризации кристаллографической текстуры по взвешенной выборке ориентаций кристаллитов (ПККТ). – **Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ** № 2021662416 от 28.07.2021

11. **Ostapovich K.V.**, Trusov P.V. On using Monte-Carlo simulations for sampling crystallite orientations from given texture data // Lobachevskii Journal of Mathematics. – 2022. – Vol. 43, No. 7. – P. 1962–1975. **Scopus**

12. Трусов П.В., **Остапович К.В.** Пакет подпрограмм для генерации выборок ориентаций кристаллических решеток по набору полюсных фигур (crystex). – **Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ** № 2023668203 от 24.08.2023

13. Trusov P.V., **Ostapovich K.V.** On Implementing Boundary Conditions for a Rate-Form Quasi-Static Contact Problem with Friction: A Node-to-Facet Finite Element Approach // Lobachevskii Journal of Mathematics. – 2023. – Vol. 10, No. 23 *(принята к публикации)*. **Scopus**