

DOI: 10.7242/1999-6691/2018.11.2.17

УДК 539.52

ОБ ОЦЕНКЕ ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ СТАТИСТИЧЕСКИХ МНОГОУРОВНЕВЫХ МОДЕЛЕЙ ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МЕТАЛЛОВ К ВОЗМУЩЕНИЯМ ПАРАМЕТРОВ

А.И. Швейкин, Э.Р. Шарифуллина, П.В. Трусов, Д.А. Пушков

Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь, Российская Федерация

Важным этапом исследования свойств нелинейных математических моделей является оценка влияния отклонений параметров, характеризующих свойства описываемого объекта, на изменение отклика (анализ чувствительности к возмущениям параметров модели). Актуальность рассмотрения этого для моделей материалов обусловлена стохастичностью большинства их физико-механических характеристик, в связи с чем к разрабатываемым для технологических процессов конститутивным моделям предъявляются повышенные требования по устойчивости к материальным параметрам. Последнее позволяет исключить в каждом частном случае необходимость проведения точной экспериментальной идентификации свойств материала конкретного изделия. Для исследования и оптимизации технологических процессов обработки металлов и изделий давлением с достижением интенсивных пластических деформаций целесообразно применять многоуровневые конститутивные модели материалов, позволяющие явным образом описывать механизмы неупругого деформирования, а также перестройку структуры материала и изменение определяемых ее состоянием физико-механических свойств. В статье приводится методика оценки чувствительности таких моделей к возмущениям параметров, основанная на интегральном сопоставлении историй откликов для нескольких видов нагружений при использовании в моделях возмущенных и невозмущенных параметров. Обсуждаются результаты приложения предложенной методики к двухуровневой статистической модели поликристаллических металлов, учитывающей внутризеренное дислокационное скольжение и ротацию решеток кристаллитов, и к ее модификации – трехуровневой модели, дополнительно содержащей описание механизма зернограничного скольжения. Полученные результаты свидетельствуют об устойчивости этих математических моделей к возмущениям параметров. На основе выполненного анализа осуществлено ранжирование параметров рассмотренных моделей по степени чувствительности к их возмущению.

Ключевые слова: многоуровневая конститутивная модель материала, чувствительность математической модели, возмущение параметров модели

ABOUT ESTIMATION OF SENSITIVITY OF STATISTICAL MULTILEVEL POLYCRYSTALLINE METAL MODELS TO PARAMETER VARIATIONS

A.I. Shveykin, E.R. Sharifullina, P.V. Trusov and D.A. Pushkov

Perm National Research Polytechnic University, Perm, Russian Federation

Analysis of the influence of variations of the parameters characterizing the properties of a modeled object on response change (sensitivity analysis for model parameter perturbations) is an important stage in studying the features of nonlinear mathematical models. The relevance of this research for material models is based on stochasticity of most material characteristics, and therefore constitutive mathematical models used in technological processes calculations must be stable with regard to variation of material parameters, which allows one to avoid precise experimental identification of product material properties in each particular case. It is reasonable to use multilevel constitutive models of materials, which makes it possible to describe explicitly the mechanisms of inelastic deformation, as well as the material structure evolution and the corresponding changes in physical and mechanical properties. This article provides the method of sensitivity estimation to parameter perturbations for models of this type, which is based on an integral comparison of response histories for perturbed and unperturbed sets of parameters for several types of loading. The results of application of the proposed technique to the two-level statistical model of polycrystalline metals, which includes the description of intragranular dislocation sliding and crystallite lattice rotations, and to the modified three-level model, which additionally contains the description of grain-boundary sliding mechanism, are presented. The obtained results demonstrate the stability of the considered mathematical models with respect to parameter changes. The ordering of model parameters by their sensitivity to perturbations is performed on the basis of the analysis carried out in this study.

Key words: multilevel constitutive model, mathematical model sensitivity, variations of model parameters

1. Введение

Для совершенствования существующих и разработки новых методов обработки металлов давлением с достижением интенсивных пластических деформаций перспективным представляется применение многоуровневых конститутивных моделей материалов [1–5]. Это обусловлено тем, что такие модели, в отличие от макрофеноменологических, позволяют явным образом описывать физические механизмы неупругого деформирования и перестройку структуры материала, и, следовательно, изменение определяемых ее состоянием физико-механических свойств. Данные возможности обеспечиваются использованием в многоуровневых моделях материалов внутренних переменных, характеризующих мезо- и микроструктуру, а также кинетических уравнений для их изменения [6–9].

Число вводимых в многоуровневых моделях поликристаллических металлов внутренних переменных может быть значительным (в частности, для рассмотренных далее в статье примеров), однако сложность разработки и эксплуатации таких моделей вполне сопоставима с аналогичными действиями для моделей

макрофеноменологических теорий пластичности. В последних, в силу наличия у неупруго деформируемых твердых тел свойства памяти, в общем случае необходимо использовать операторы или функционалы, учитывающие предысторию воздействий [7, 10]. Для описания отклика материала при существенно различных воздействиях (при разных траекториях кинематического нагружения, характерных для технологических процессов обработки) оператор должен включать в себя либо выбор частных соотношений для реализуемого нагружения (например, в рамках теории упруго-пластических процессов А.А.Ильюшина [11], в структурно-аналитическом подходе В.А.Лихачева, В.Г. Малинина [12]), либо напрямую содержать аппроксимацию экспериментальных данных для различных воздействий (видов нагружений) за счет введения соответствующих материальных функций [13], потребность в этом обусловлена, в частности, нарушением гипотезы единой кривой. Таким образом, существенным недостатком макрофеноменологических моделей с позиции их применимости для исследования технологических процессов, помимо неспособности отразить изменение структуры, является необходимость проведения экспериментов для большого числа вероятных траекторий нагружения и учета полученных данных в операторе модели. В многоуровневых моделях память материала хранится в большом наборе значений внутренних переменных, что позволяет осуществлять формулировку определяющих и кинетических соотношений в виде простых операторов, например, систем дифференциальных уравнений. При этом параметры модели постоянны для конкретного материала (а для ряда характеристик — для класса материалов), модель с ними может использоваться при любых нагружениях (в случае корректного учета ключевых механизмов деформирования позволяет описывать поведение материала в широком диапазоне параметров воздействия [2–5]). Стоит отметить, что многоуровневые модели тоже существенно нелинейны, в частности, из-за учета взаимодействий множества переменных.

Один из способов исследования «качества» математических моделей заключается в оценке их чувствительности к параметрам [14–16], под которыми в широком смысле понимаются материальные функции и константы, включенные в определяющие уравнения (оператор) модели, начальные условия и входные данные (параметры воздействия). Чувствительностью называется зависимость изменения выходных данных модели от вариации ее параметров; способы оценки чувствительности кратко представлены в разделе 3. Чувствительность нелинейных математических моделей анализируется в различных областях: популяционной динамике [17], агроэкологии [18], океанологии [19], химии [20] и других. В механике деформируемого твердого тела для исследования чувствительности моделей (в большинстве случаев — конструкций) к изменениям воздействий, геометрических параметров или параметров материала часто применяется конечно-элементная схема, с использованием которой в явном виде находятся производные отклика по параметрам [21–24]. При этом в качестве отклика наряду с напряжениями может рассматриваться некоторая целевая функция, характеризующая, например, запас прочности или стоимость конструкции [21]. Таким способом можно провести исследование чувствительности прямых конститутивных моделей поликристаллов, включающих решение краевой задачи на мезомасштабном уровне [5], а также моделей конструкций с применением статистических конститутивных моделей поликристаллических материалов [4].

Между тем важной представляется и задача оценки чувствительности собственно статистических конститутивных моделей поликристаллов к возмущениям воздействий и параметров модели (что эквивалентно неточности их определения). Именно она рассмотрена в настоящей статье. Актуальность ее решения обусловлена стохастическим характером свойств материала: применяемые в технологических расчетах математические модели материалов должны быть устойчивы по отношению к изменению свойств, то есть небольшие отклонения во входных параметрах должны приводить к малым отклонениям отклика, это необходимо для обоснования возможности избежать проведения для каждого конкретного изделия точной экспериментальной идентификации свойств материала. Стоит отметить, что анализ устойчивости важен также при проведении процедуры идентификации разрабатываемых новых моделей материалов [25, 26]: если для установленных из физических соображений диапазонов изменения параметров наблюдается существенная чувствительность модели, то ужесточается требование к точности экспериментов и их стабильной повторяемости.

Раздел 2 содержит краткое описание базовой конститутивной двухуровневой модели поликристалла и данные вычислений, полученные с ее использованием при некоторых видах нагружений, а также соотношения трехуровневой модели поликристалла, включающей описание механизма зернограничного скольжения.

Метод оценки чувствительности модели, заключающийся в определении отклонения отклика при задании отклонений воздействий или параметров приводится в разделе 3, а результаты его применения для рассматриваемых моделей — в разделе 4. В заключении суммируются выводы по статье.

2. Краткое описание базовой конститутивной статистической многоуровневой модели поликристаллического материала и результатов моделирования некоторых процессов нагружения

Объему поликристаллического материала на макроуровне ставится в соответствие выборка кристаллитов, деформирование которых предполагается однородным — используется обобщенная

гипотеза Фойгта о равенстве градиента скорости перемещений на мезо- и макроуровнях [4, 27–29]. Стоит отметить, что по причине большой ресурсоемкости самосогласованных и прямых моделей [4, 5] именно статистические модели наиболее часто применяются в настоящее время для исследования технологических процессов термомеханической обработки.

На макромасштабном уровне система уравнений принимает следующий вид (здесь и далее величины макромасштабного уровня обозначены заглавными буквами, аналогичные величины мезоуровня, то есть уровня кристаллита, — такими же строчными буквами; для облегчения записи индекс кристаллита опущен) [30]:

$$\begin{aligned} \mathbf{K}^{\text{cor}} &\equiv \dot{\mathbf{K}} - \bar{\boldsymbol{\Omega}} \cdot \mathbf{K} + \mathbf{K} \cdot \bar{\boldsymbol{\Omega}} = \bar{\boldsymbol{\Pi}} : (\mathbf{L} - \bar{\boldsymbol{\Omega}} - \mathbf{Z}_s^{\text{in}}), & 1 \\ \bar{\boldsymbol{\Omega}} &= \langle \bar{\boldsymbol{\omega}} \rangle, & 2 \\ \bar{\boldsymbol{\Pi}} &= \langle \bar{\boldsymbol{\pi}} \rangle, & 3 \\ \mathbf{Z}_s^{\text{in}} &= \langle \mathbf{z}_s^{\text{in}} \rangle + \bar{\boldsymbol{\Pi}}^{-1} : \langle \bar{\boldsymbol{\pi}}' : \mathbf{z}_s^{\text{in}'} \rangle + \bar{\boldsymbol{\Pi}}^{-1} : (\langle \boldsymbol{\kappa}' \cdot \bar{\boldsymbol{\omega}}' \rangle - \langle \bar{\boldsymbol{\omega}}' \cdot \boldsymbol{\kappa}' \rangle). & 4 \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь: определяющее соотношение (1)₁ сформулировано в терминах текущей конфигурации; \mathbf{K} — взвешенный тензор напряжений Кирхгоффа макроуровня, $\mathbf{K} = \left\langle \frac{\circ}{\rho / \hat{\rho}} \right\rangle \boldsymbol{\Sigma}$, где $\boldsymbol{\Sigma}$ — тензор напряжений

Коши макроуровня, $\left\langle \frac{\circ}{\rho / \hat{\rho}} \right\rangle$ — среднее отношение плотности в отсчетной и текущей конфигурации

для кристаллитов, составляющих представительный объем макроуровня (согласно обобщенной гипотезе Фойгта эта величина для всех кристаллитов одинакова); $\mathbf{K}^{\text{cor}} \equiv \dot{\mathbf{K}} - \bar{\boldsymbol{\Omega}} \cdot \mathbf{K} + \mathbf{K} \cdot \bar{\boldsymbol{\Omega}}$ — не зависящая от выбора системы отсчета скорость изменения (коротационная производная) тензора напряжений Кирхгоффа; кинематическое воздействие задано транспонированным градиентом скорости перемещений $\mathbf{L} = \hat{\nabla} \mathbf{v}^T$ на макроуровне; на макроуровень из модели мезоуровня передаются тензор спина подвижной системы координат $\bar{\boldsymbol{\Omega}}$ (соотношение (1)₂) и тензор упругих свойств $\bar{\boldsymbol{\Pi}}$ (соотношение (1)₃) с помощью операции осреднения по представительному макрообъему (среднее по выборке кристаллитов); тензор скорости неупругих деформаций \mathbf{Z}_s^{in} следует из модели мезоуровня с использованием процедуры согласования определяющих соотношений [30] макроуровня и мезоуровня (для обеспечения равенства макронапряжений осредненным мезонапряжениям $\mathbf{K} = \langle \boldsymbol{\kappa} \rangle$); $\langle \cdot \rangle$ — символ операции осреднения по представительному макрообъему, \mathbf{a}' — обозначение отклонения тензорной характеристики \mathbf{a} в рассматриваемом кристаллите от среднего по представительному макрообъему значения, $\mathbf{a}' = \mathbf{a} - \langle \mathbf{a} \rangle$ (операция осреднения обладает свойством $\langle \mathbf{a}' \rangle = \mathbf{0}$ для любой \mathbf{a}).

В структуре модели (1) отражаются возможности многоуровневых моделей для представления параметров макроуровня как эффективных величин, интегрально характеризующих процессы деформирования на мезоуровне, в частности разрешается вопрос определения коротационной производной, являющийся важным при построении моделей для описания технологических процессов с характерными большими градиентами перемещений (геометрической нелинейностью) — используется информация о подвижных системах координат отдельных кристаллитов, которые связываются с симметричными элементами кристаллитов [31], при этом изменение симметрии материала на макроуровне в результате формирования текстуры не требует корректирования конститутивной модели.

Система уравнений на мезоуровне (применяется для каждого кристаллита, для упрощения записи индекс кристаллита опущен) имеет следующий вид [32]:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\kappa}^{\text{cor}} &\equiv d\boldsymbol{\kappa} / dt + \boldsymbol{\kappa} \cdot \bar{\boldsymbol{\omega}} - \bar{\boldsymbol{\omega}} \cdot \boldsymbol{\kappa} = \bar{\boldsymbol{\pi}} : \left(\mathbf{1} - \bar{\boldsymbol{\omega}} - \sum_{k=1}^K \dot{\gamma}^{(k)} \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)} \right), & 1 \\ \dot{\gamma}^{(k)} &= \dot{\gamma}_0 \left(\tau^{(k)} / \tau_c^{(k)} \right)^m H(\tau^{(k)} - \tau_c^{(k)}), \quad k = 1, \dots, K, & 2 \\ \tau^{(k)} &= \boldsymbol{\kappa} : \mathbf{n}^{(k)} \mathbf{b}^{(k)}, \quad k = 1, \dots, K, & 3 \\ \dot{\tau}_c^{(k)} &= [\text{соотношения для определения } \dot{\tau}_c^{(k)}], \quad k = 1, \dots, K, & 4 \\ \bar{\boldsymbol{\omega}} &= [\text{соотношения для определения } \bar{\boldsymbol{\omega}}], \quad \dot{\boldsymbol{\omega}} \cdot \boldsymbol{\omega}^T = \bar{\boldsymbol{\omega}}. & 5 \end{aligned} \quad (2)$$

В формулировке (2) принято: $\boldsymbol{\kappa} = \left\langle \frac{\circ}{\rho / \hat{\rho}} \right\rangle \boldsymbol{\sigma}$ — взвешенный тензор напряжений Кирхгоффа мезоуровня; $\boldsymbol{\sigma}$ — тензор напряжений Коши мезоуровня; $\bar{\boldsymbol{\omega}}$ — спин подвижной системы координат, связанной

с решеткой [31]; $\bar{\mathbf{n}}$ — тензор упругих свойств (компоненты которого постоянны в базисе подвижной системы координат); $\mathbf{l} = \hat{\mathbf{v}} \mathbf{v}^T$ — транспонированный градиент скорости перемещений (задается согласно обобщенной гипотезе Фойгта $\mathbf{l} = \hat{\mathbf{v}} \mathbf{v}^T = \hat{\mathbf{v}} \hat{\mathbf{v}}^T = \mathbf{L}$, где $\hat{\mathbf{v}} \hat{\mathbf{v}}^T$ берётся с макромасштабного уровня); $\mathbf{b}^{(k)}$, $\mathbf{n}^{(k)}$ — единичные векторы направления скольжения и нормали к плоскости скольжения (в актуальной конфигурации) краевых дислокаций; k — число кристаллографических систем скольжения. Соотношения (2₄), (2₅) приведены в общем виде (в различных моделях могут использоваться разные операторы, в частности, подмодели, алгоритмы).

Как отмечается в [33], подвижная система координат может быть связана с элементами симметрии материала (например, с кристаллографическими направлением и плоскостью), что обуславливает соответствующий выбор коротационной производной; подход подробно описан в [31]. В этом случае для наблюдателя в фиксированной лабораторной системе координат тензоры, входящие в формулировку конститутивной модели, будут изменяться как индифферентные, что позволяет удовлетворить принципу независимости определяющего соотношения от выбора системы отсчета (в отличие от случая, когда постулируется постоянство тензора свойств при формулировке линейного определяющего соотношения в актуальной конфигурации — из принципа следует, что тензор свойств может быть только изотропным [10]). При проведении расчетов, результаты которых представлены в статье, во всех случаях для нахождения спина (2₅) применялось выражение [31]:

$$\begin{aligned} \bar{\boldsymbol{\omega}} = & \mathbf{k}_i \mathbf{k}_i = -(\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{l}^c \cdot \mathbf{k}_1) \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 - (\mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{l}^c \cdot \mathbf{k}_1) \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_3 + (\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{l}^c \cdot \mathbf{k}_1) \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_1 - \\ & - (\mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{l}^c \cdot \mathbf{k}_2) \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 + (\mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{l}^c \cdot \mathbf{k}_1) \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_1 + (\mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{l}^c \cdot \mathbf{k}_2) \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_2, \end{aligned} \quad (3)$$

где \mathbf{k}_i — ортонормированный базис подвижной системы координат, ориентация которой относительно фиксированной лабораторной системы задается собственно ортогональным тензором \mathbf{o} , $\mathbf{l}^c = \mathbf{l} - \sum_{k=1}^K \dot{\gamma}^{(k)} \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)}$ — упругая составляющая градиента скорости перемещений. В (3) находит отражение инвариантность решетки (а следовательно, подвижной системы координат) при пластическом деформировании за счет движения краевых дислокаций по системам скольжения [31]. Как направление развития моделей данного класса можно отметить усовершенствование описания ротации решетки кристаллитов путем включения в уравнения силовых (моментных) факторов, возникающих от взаимодействия дефектов соседних зерен (субзерен) [30].

Для установления скоростей сдвигов $\dot{\gamma}^{(k)}$ на системах скольжения во многих моделях [2–5] используется вязкопластическое соотношение (2₂), где $\tau^{(k)}$, $\tau_c^{(k)}$ — сдвиговое (2₃) и критическое сдвиговое напряжение на k -й системе скольжения, $\dot{\gamma}_0$ — скорость сдвига по системе скольжения при достижении касательным напряжением критического напряжения сдвига, m — показатель скоростной чувствительности материала, $H(\cdot)$ — функция Хевисайда. Критические напряжения сдвига $\tau_c^{(k)}$ по системам скольжения в общем случае являются функциями накопленных к текущему моменту сдвигов и истории их изменения [30, 34, 35]. Для определенности при проведении расчетов для данной статьи во всех случаях применялся закон упрочнения вида [27, 36]:

$$\dot{\tau}_c^{(k)} = \sum_{l=1}^K h^{(kl)}(\boldsymbol{\sigma}) \dot{\gamma}^{(l)}, \quad h^{(kl)} = [q_{lat} + (1 - q_{lat}) \delta^{(kl)}] h^{(l)}, \quad h^{(l)} = h_0 \left| 1 - \tau_c^{(l)} / \tau_{sat} \right|^a, \quad (4)$$

где параметр латентного упрочнения q_{lat} принимает значение 1,0 для компланарных и 1,4 — для некомпланарных систем скольжения (с номерами k и l), $\delta^{(kl)}$ — дельта Кронекера, τ_{sat} — так называемое напряжение насыщения [27, 36], параметры h_0 , a находятся из экспериментальных данных.

В работах [32, 37] показано, что при условии малости упругих деформаций (характерных для металлов и сплавов) система (2) дает результаты, близкие к получаемым с использованием других альтернативных моделей мезоуровня, в том числе с наиболее популярной формулировкой определяющих соотношений в терминах разгруженной конфигурации [27, 35, 36]. Приведенные здесь для примера уравнения мезоуровня применимы для описания наиболее важных механизмов неупругого деформирования (за счет движения краевых дислокаций), при моделировании процессов термомеханической обработки может понадобиться учет в модели температуры и зависящих от нее значимых физических механизмов (двойникования, фрагментации, твердотельных фазовых превращений и других). Развитие многоуровневых моделей в этом направлении является предметом исследований многих научных коллективов [4, 5].

В численных расчетах рассматривался представительный объем поликристалла с гранцентрированной кубической решеткой (далее ГЦК-поликристалла) в рамках статистической модели, включающий выборку из 343 кристаллитов, начальные ориентации которых распределены случайно по равномерному закону. Номинальные свойства соответствовали меди. Принимались независимые компоненты тензора упругих свойств мезоуровня, постоянные для наблюдателя в жесткой подвижной системе координат, связанной с решеткой: $\bar{p}_{1111} = 168,4$ ГПа, $\bar{p}_{1122} = 121,4$ ГПа, $\bar{p}_{1212} = 75,4$ ГПа [38]; в вязкопластическое соотношение входили параметры: $\dot{\gamma}_0 = 0,001 \text{ с}^{-1}$, $1/m = 0,012$; параметры закона упрочнения составляли: $h_0 = 180$ МПа, $\tau_{\text{sat}} = 148$ МПа, $a = 2,25$; критические напряжения для всех систем скольжения имели начальные значения: $\tau_c^{(k)}(0) = \tau_{c0} = 16$ МПа, $k = 1, \dots, K$ [27, 36].

Результаты моделирования для простых нагружений (осадки вдоль оси 1_3 лабораторной системы координат и сдвига плоскостей $(1_2, 1_3)$ в направлении (-1_2)), полученные с использованием базовой модели (1)–(4), близки к представленным в [39].

На рисунке 1 приведены зависимости компоненты $(-\Sigma_{33})$ тензора истинных напряжений Коши на макроуровне от компоненты $(-H_{33})$ логарифмической меры деформации при одноосном сжатии и зависимость компоненты $(-\Sigma_{23})$ тензора истинных напряжений Коши на макроуровне от величины сдвига при простом сдвиге. Хотя используемые при расчете параметры были определены при идентификации на основе рассмотрения сжатия [27], результаты изменения сдвиговых напряжений при простом сдвиге находятся в хорошем соответствии с экспериментальными данными.

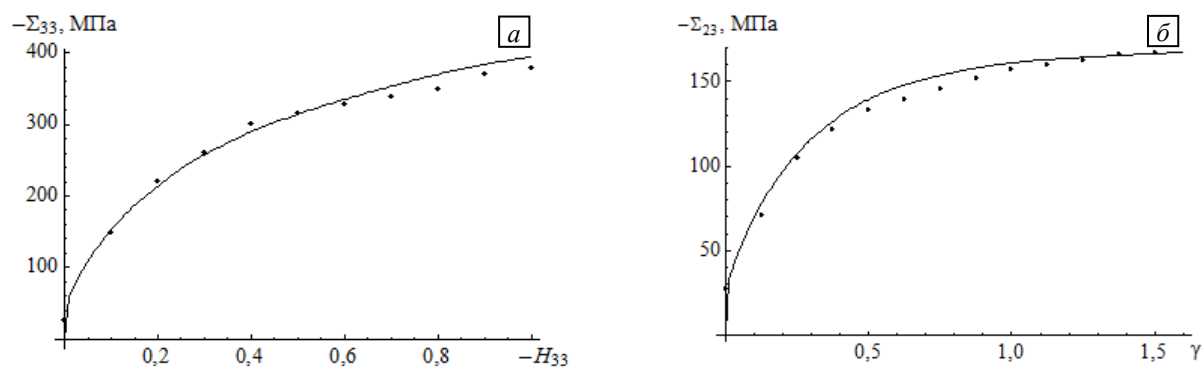


Рис. 1. Зависимости $(-\Sigma_{33})$ от H_{33} при одноосном сжатии (а) и $(-\Sigma_{23})$ от величины сдвига при простом сдвиге (б); точками показаны экспериментальные данные из [27], сплошной линией – результаты авторского моделирования

Рисунок 2 содержит полюсные фигуры при осадке (для момента $H_{33} = -1$) и сдвиге (для момента $\gamma = 1,4$); точки обозначают отображения направления $\langle 111 \rangle$ отдельных кристаллитов на полюсной фигуре. Полученные при моделировании полюсные фигуры находятся в хорошем качественном соответствии с экспериментальными данными [27, 36].

С использованием модели (1)–(4) также исследовалось кинематическое нагружение по двухэтапным траекториям вида «простой сдвиг – простой сдвиг» с постоянными градиентами скоростей деформации:

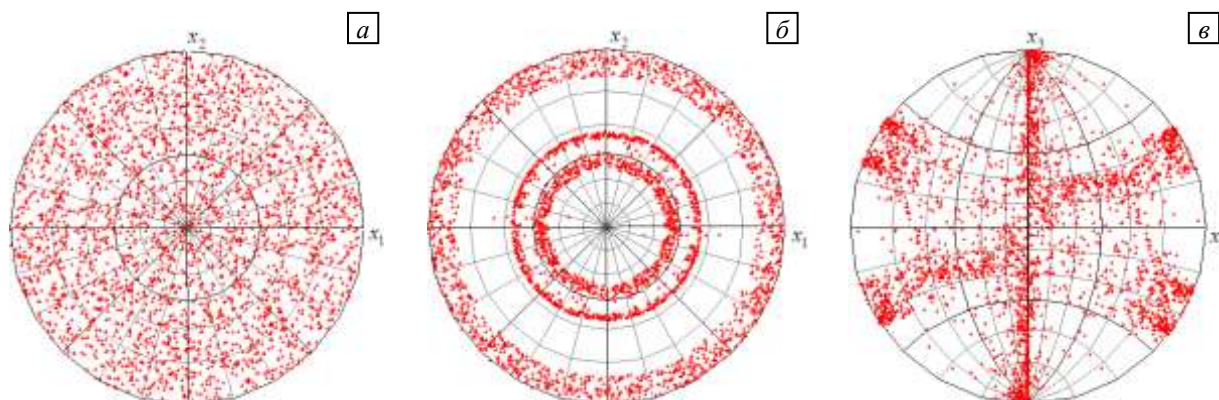


Рис. 2. Прямые полюсные фигуры для направлений $\langle 111 \rangle$: в начальный момент времени для всех нагружений (а); после осадки до $H_{33} = -1$ (б); после простого сдвига до $\gamma = 1,4$ (в); при построении фигур (а, б) проецирование осуществлялось вдоль 1_3 , а фигуры (в) – вдоль 1_1

– на этапе I

$$\hat{\nabla} \mathbf{v}_I^T = 5 \times 10^{-4} (\mathbf{I}_1 \mathbf{I}_1 - \mathbf{I}_2 \mathbf{I}_2 + \mathbf{I}_1 \mathbf{I}_2 - \mathbf{I}_2 \mathbf{I}_1) \text{ c}^{-1},$$

– на этапе II

$$\hat{\nabla} \mathbf{v}_{II}^T = 5 \times 10^{-4} (\mathbf{I}_1 \mathbf{I}_1 - \cos^2 \psi \mathbf{I}_2 \mathbf{I}_2 - \sin^2 \psi \mathbf{I}_3 \mathbf{I}_3 + \cos \psi (\mathbf{I}_1 \mathbf{I}_2 - \mathbf{I}_2 \mathbf{I}_1) + \sin \psi (\mathbf{I}_1 \mathbf{I}_3 - \mathbf{I}_3 \mathbf{I}_1) - \cos \psi \sin \psi (\mathbf{I}_2 \mathbf{I}_3 + \mathbf{I}_3 \mathbf{I}_2)) \text{ c}^{-1}, \tag{5}$$

где параметр ψ — угол поворота перед вторым этапом. Каждый из этапов деформирования имел длительность 1000 с.

На рисунке 3 демонстрируются полученные по (1)–(4) для нагружения (5) зависимости компонент тензора напряжений Коши на макроуровне (для поликристалла) от времени для $\psi = 45^\circ$ и $\psi = 90^\circ$. Данные свидетельствуют о приобретении материалом после этапа I анизотропии пластических свойств.

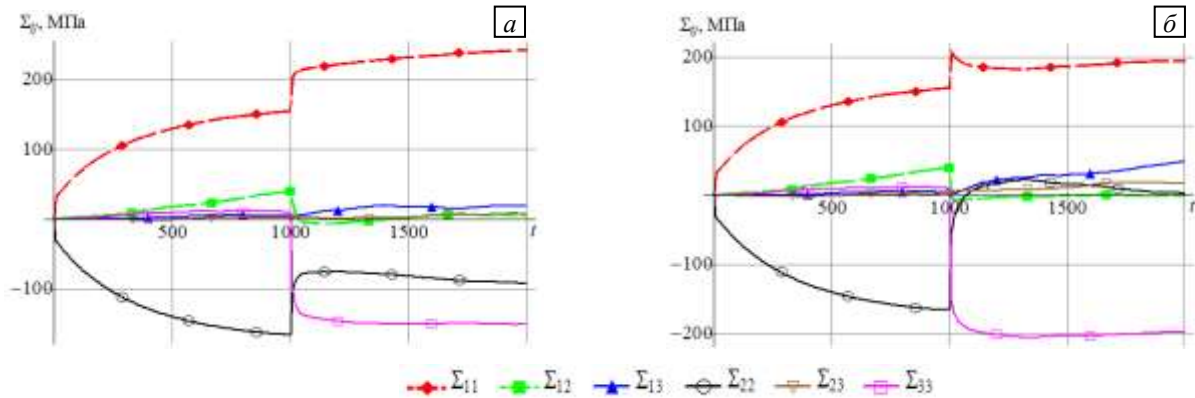


Рис. 3. Зависимость от времени компонент тензора напряжений Коши Σ на макроуровне в лабораторной системе координат для ГЦК-поликристалла при разном значении угла ψ , град: 45 (а); 90 (б)

На рисунке 4 приведены прямые полюсные фигуры для поликристаллического агрегата в различных конфигурациях. Наблюдается возникновение значительной неоднородности распределения ориентаций кристаллитов, что отражается в появлении анизотропии упругих свойств материала на макромасштабном уровне [40].

Результаты, которые содержат рисунки 1–4, были использованы далее в качестве базовых при оценке чувствительности двухуровневой математической модели материала.

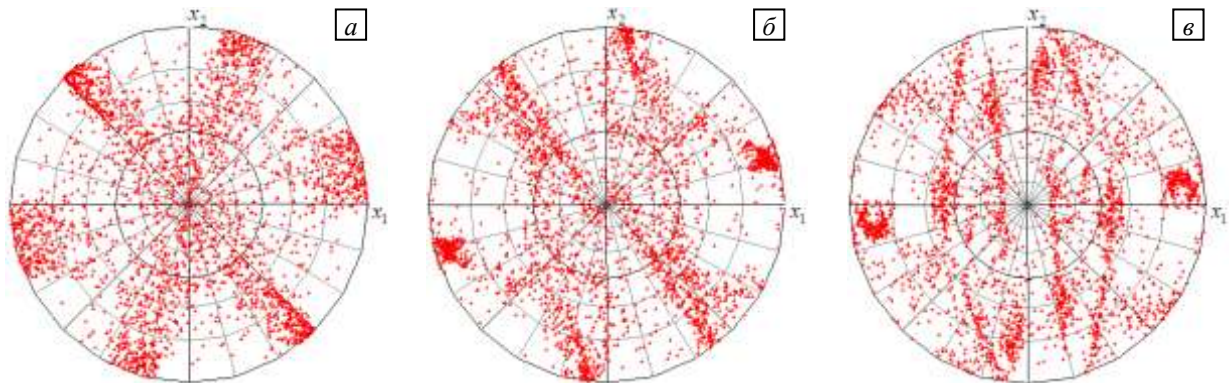


Рис. 4. Прямые полюсные фигуры для направлений $\langle 111 \rangle$ (проецирование вдоль \mathbf{I}_3): конечная конфигурации этапа I (а), конечная конфигурация этапа II при $\psi = 45^\circ$ (б) и $\psi = 90^\circ$ (в)

Одним из преимуществ аппарата многоуровневых моделей является возможность учета всех ключевых механизмов. Для примера приведем модифицированную модель, содержащую описание механизма зернограничного скольжения, значимость которого возрастает при повышенных температурах и мелкозернистой структуре материала [41–45]. В этом случае в определяющее соотношение (1)₁ вводится \mathbf{z}_{gb}^{in} — еще одна составляющая тензора скорости неупругих деформаций. Она отвечает за зернограничное скольжение и представляет собой осредненную в представительном макрообъеме характеристику, то есть определяет действие механизма статистически в рамках используемого многоуровневого подхода [46]:

$$\mathbf{z}_{gb}^{in} = \sum_{i=1}^{4K_{gb}} \dot{\gamma}_{gb}^{(i)} \mathbf{b}_{gb}^{(i)} \mathbf{n}_{gb}^{(i)}, \quad (6)$$

и соотношение (1)₁ для трехуровневой модели приобретает вид: $\mathbf{K}^{cor} \equiv \dot{\mathbf{K}} - \bar{\boldsymbol{\Omega}} \cdot \mathbf{K} + \mathbf{K} \cdot \bar{\boldsymbol{\Omega}} = \bar{\boldsymbol{\Pi}} : (\mathbf{Z} - \mathbf{Z}_s^{in} - \mathbf{z}_{gb}^{in})$. При этом (6) предполагает, что во всем представительном макрообъеме скорость относительного смещения кристаллитов вдоль общей границы (плоской фасетки с нулевой толщиной) по направлению i -го смещения аппроксимируется скоростью сдвига $\dot{\gamma}_{gb}^{(i)}$ [47]; K_{gb} — количество возможных плоскостей зернограницных смещений, в качестве которых рассматриваются все границы кристаллитов, а $4K_{gb}$ — общее количество направлений смещения по всем фасеткам границ представительного макрообъема; $\mathbf{b}_{gb}^{(i)}$ и $\mathbf{n}_{gb}^{(i)}$ — направление смещения в фасетке и нормаль к ее плоскости (одно из направлений смещения для каждой границы «привязывается» к материалу одного из граничащих кристаллитов — к его решетке).

Соотношение для скоростей зернограницных сдвигов установлено по аналогии с выводом уравнения Орована и базируется на известном законе Аррениуса [47] с использованием параметра скоростной чувствительности n :

$$\dot{\gamma}_{gb}^{(i)} = \dot{\gamma}_{gb0}^{(i)} \left(\frac{\tau_{gb}^{(i)}}{\tau_{cgb}^{(i)}} \right)^n \exp \left(- \frac{\Delta F}{k\theta} \right) H(\tau_{gb}^{(i)} - \tau_{cgb}^{(i)}), \quad i = 1, 2, \dots, 4K_{gb}, \quad (7)$$

где $\dot{\gamma}_{gb0}^{(i)}$ — характерная скорость сдвига по фасетке границы, $\tau_{gb}^{(i)}$ и $\tau_{cgb}^{(i)}$ — сдвиговое и критическое сдвиговое напряжение по i -му направлению, ΔF — величина энергетического барьера (энергия активации зернограницного сдвига), k — постоянная Больцмана, θ — температура.

Эволюционное уравнение для критического напряжения зернограницного сдвига $\tau_{cgb}^{(i)}$ в общем виде представляется [46, 48] как

$$\dot{\tau}_{cgb}^{(i)} = h \left(1 - \exp \left(- \frac{q}{\gamma_{gb}^{(i)}} \right) \right) \dot{\gamma}_{gb}^{(i)} - \sum_{j=1}^2 \sum_{k=1}^{K_j} g_k^i \dot{\gamma}^{(k)(j)} (\mathbf{b}^{(k)(j)} \cdot \mathbf{N}^{(k)(j)}) H(\mathbf{b}^{(k)(j)} \cdot \mathbf{N}^{(k)(j)}) H(\gamma_{gb}^{(i)} - \sigma_{bb} \frac{c}{s} \exp \left(- \frac{U_d}{k\theta} \right) H(\gamma_{gb}^{(i)}). \quad (8)$$

Здесь: h — коэффициент упрочнения, зависящий от среднего размера кристаллитов; q — безразмерный параметр модели; $\gamma_{gb}^{(i)}$ — накопленный сдвиг по направлению i в рассматриваемой фасетке границы; g_k^i — компоненты матрицы упрочнения (разупрочнения) за счет решеточных дислокаций, выходящих на фасетку; $\dot{\gamma}^{(k)(j)}$ — скорость сдвига по системе скольжения k в j -м кристаллите (одном из двух прилегающих к фасетке); K_j — число систем скольжения в j -м зерне; $\mathbf{b}^{(k)(j)}$ — единичный вектор направления скольжения k в j -м кристаллите; $\mathbf{N}^{(k)(j)}$ — внешняя нормаль к плоскости фасетки границы для j -го кристаллита; $\sigma_{bb} = \left| \mathbf{b}_{gb}^{(i)} \cdot \left(\sum_{j=1}^2 \boldsymbol{\sigma}^{(i)(j)} / 2 \right) \cdot \mathbf{b}_{gb}^{(i)} \right|$ — нормальное напряжение в направлении сдвига по границе $\mathbf{b}_{gb}^{(i)}$ (на площадке, ортогональной $\mathbf{b}_{gb}^{(i)}$), определяемое с осреднением напряжений $\boldsymbol{\sigma}^{(i)(j)}$ в составляющих границу кристаллитах; c — коэффициент диффузии; s — площадь рассматриваемой фасетки границы; U_d — энергия активации зернограницной диффузии. В соотношении (8) первое слагаемое учитывает влияние на зернограницное скольжение соседних кристаллитов как возможных препятствий (коэффициент h уменьшается при более мелкозернистой структуре, что приводит к облегчению зернограницного скольжения), а также «механическое выглаживание» границ при проскальзывании по ним; второе слагаемое описывает приток решеточных дислокаций в границу, повышающих ее энергию и способствующих скольжению по данной границе; третье слагаемое действует только при активном зернограницном проскальзывании и учитывает зернограницную диффузию, в результате которой происходит дополнительное («диффузионное») «выглаживание» границ.

Роль кинематических воздействий на мезоуровне (уровне кристаллитов) в трехуровневой модели играет транспонированный градиент скорости перемещений за вычетом составляющей неупругих деформаций за счет зернограницного скольжения: $\mathbf{I} = \hat{\nabla} \mathbf{v}^T = \hat{\nabla} \mathbf{v}^T - \mathbf{z}_{gb}^{in} = \mathbf{L} - \mathbf{z}_{gb}^{in}$, где $\hat{\nabla} \mathbf{v}^T$ определен на макромасштабном уровне [46, 47].

Численные расчеты для случая изотермического деформирования представительного макрообъема поликристалла с помощью модифицированной трехуровневой модели, содержащей подмодель

для описания зернограничного скольжения (6)–(8), также проведены с использованием параметров, соответствующих меди. В том числе приняты значения параметров вязкопластического соотношения

$$\dot{\gamma}_{gb0}^{(i)} \exp\left(-\frac{\Delta F}{k\theta}\right) = 10^{-4} \text{ с}^{-1}, \quad n = 10, \quad \text{параметров закона упрочнения } h = 3 \text{ МПа}, \quad q = 0,1, \quad g_k^i = 33 \quad \forall i, k,$$

$$\frac{c}{S_i} \exp\left(-\frac{U_d}{k\theta}\right) = 0,0002 \text{ с}^{-1}, \quad \text{начальные значения критических напряжений сдвигов } \tau_{cgb}^{(i)}(0) = \tau_{cgb0} = 70 \text{ МПа}.$$

Для снижения ресурсоемкости, необходимой для расчетов при оценке устойчивости, использовалась выборка из 216 кристаллитов. Данные всех тестовых расчетов оказались близкими к полученным на выборке из 343 кристаллитов.

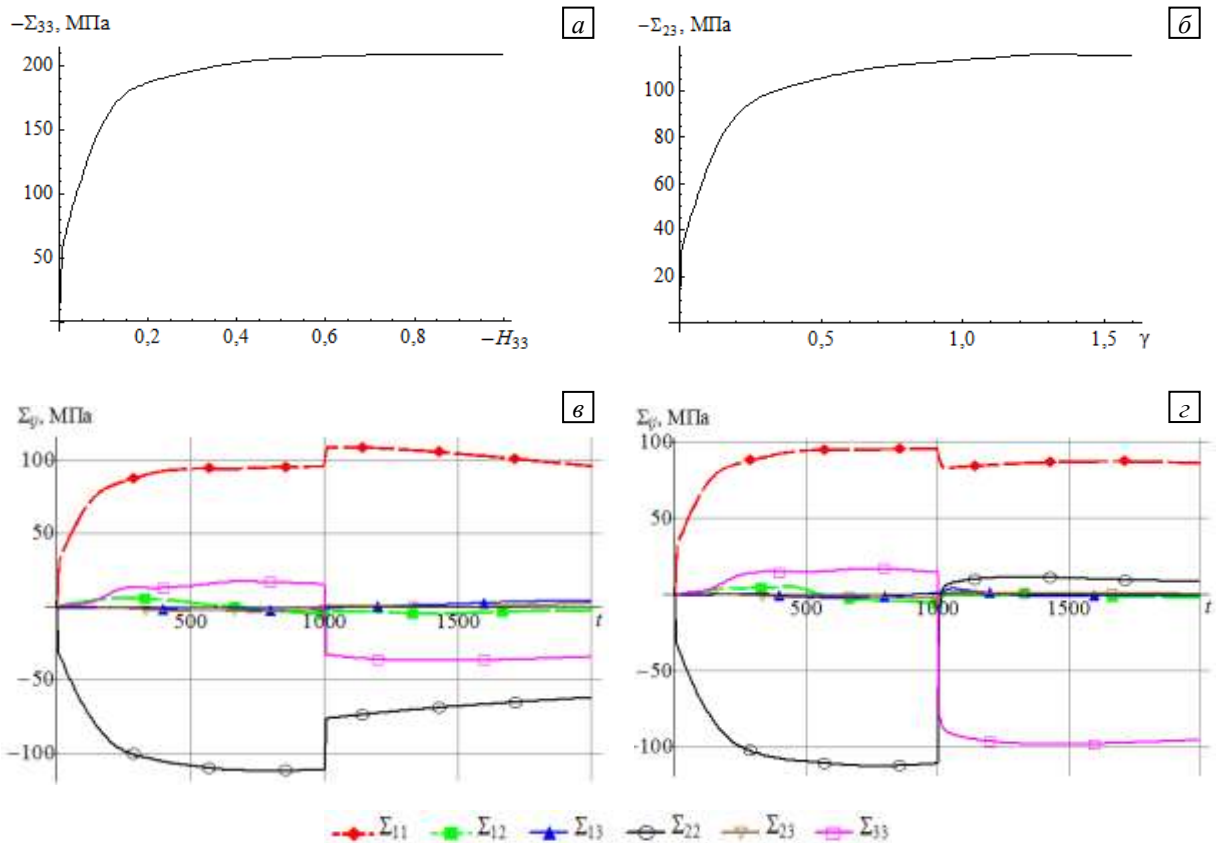


Рис. 5. Изменение компонент напряжений для различных нагружений: зависимость $(-\Sigma_{33})$ от H_{33} при одноосном сжатии (а); зависимость $(-\Sigma_{23})$ от величины сдвига при простом сдвиге (б); зависимость компонент тензора напряжений от времени для нагружения (5) при $\psi = 45^\circ$ (е) и $\psi = 90^\circ$ (з)

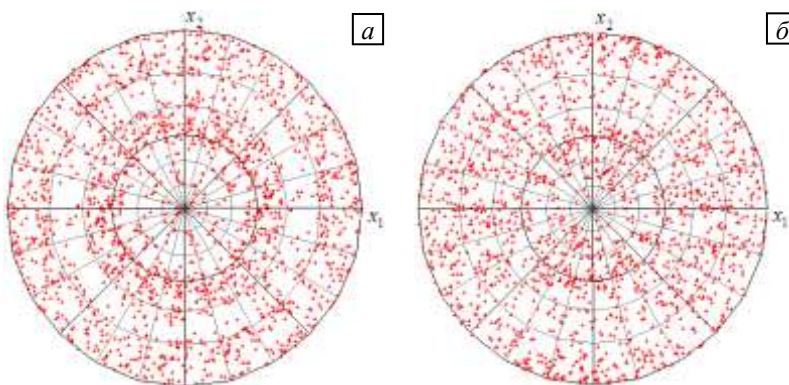


Рис. 6. Прямые полюсные фигуры для направлений $\langle 111 \rangle$ (проецирование вдоль I_3) после нагружения: одноосное сжатие до $H_{33} = -1$ (а); простой сдвиг до $\gamma = 1.4$ (б), нагружение (5) при $\psi = 45^\circ$ (е) и $\psi = 90^\circ$ (з)

Результаты применения трехуровневой модели для вышеописанных нагружений представлены далее. Данные об изменении напряжений (Рис. 5) и ориентаций кристаллитов (Рис. 6) свидетельствуют об активизации зернограничного скольжения. Также наблюдается понижение напряжений относительно данных моделирования без учета этого механизма релаксации (см. Рис. 5 в сравнении с Рис. 1, 3) и

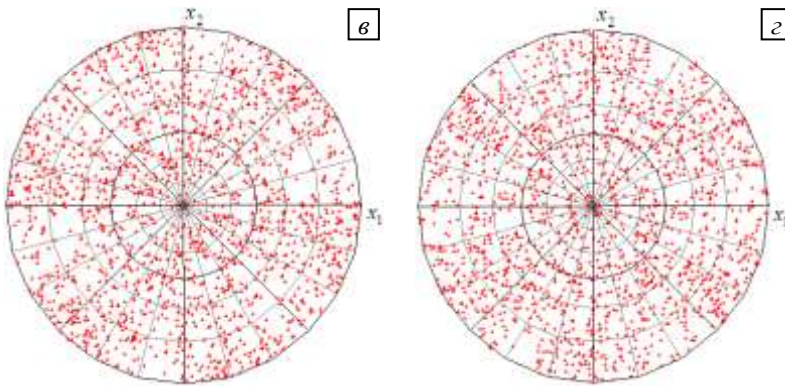


Рис. 6. Продолжение

рассеяние текстур, образовавшихся до активации зернограницного скольжения (см. Рис. 6 в сравнении с Рис. 2, 4). Оба эффекта согласуются с известными экспериментальными данными [49, 50]. Полученные результаты использованы в качестве опорных при оценке чувствительности трехуровневой математической модели материала.

3. Постановка задачи оценки чувствительности конститутивной модели к возмущениям параметров и воздействий

Произвольную математическую модель можно формально задать как оператор, связывающий входные (\mathbf{x}) и выходные (\mathbf{y}) параметры (конкретные параметры рассматриваемых многоуровневых моделей описываются ниже):

$$\mathbf{y} = \mathcal{F}(\mathbf{x}). \quad (9)$$

Локальная чувствительность модели A_{x_i} [14, 16] к изменению любого параметра x_i ($i = 1, \dots, I$, где I — общее число входных параметров) характеризуется разностью откликов, рассчитанных с использованием невозмущенного — x_i , возмущенного — $x_i^* = x_i + \delta x_i^*$, значений, отнесенной к возмущению δx_i^* [16]:

$$A_{x_i} = \left\| \frac{\mathcal{F}(\mathbf{x}|_{x_i + \delta x_i^*}) - \mathcal{F}(\mathbf{x}|_{x_i})}{\delta x_i^*} \right\|.$$

Для сопоставления устойчивости по отношению к различным параметрам в определение локальной чувствительности целесообразно внести нормирование:

$$A_{x_i} = \left(\frac{\left\| \mathcal{F}(\mathbf{x}|_{x_i + \delta x_i^*}) - \mathcal{F}(\mathbf{x}|_{x_i}) \right\|}{\left\| \mathcal{F}(\mathbf{x}|_{x_i}) \right\|} \right) / \left(\frac{\left\| \delta x_i^* \right\|}{\left\| x_i \right\|} \right). \quad (10)$$

Отметим, что в [16] предлагается его альтернативный вариант:

$$A_{x_i} = \left(\frac{\left\| \mathcal{F}(\mathbf{x}|_{x_i + \delta x_i^*}) - \mathcal{F}(\mathbf{x}|_{x_i}) \right\|}{\left\| \mathcal{F}(\mathbf{x}|_{x_i + D(\delta x_i^*)}) \right\|} \right) / \left(\frac{\left\| \delta x_i^* \right\|}{\left\| D(\delta x_i^*) \right\|} \right), \quad (11)$$

где $D(\delta x_i^*)$ — дисперсия используемого равномерного закона распределения параметра δx_i^* при нулевом математическом ожидании, при этом в [16] принято $x_i = 0$. При малых относительно x_i возмущениях δx_i^* , что характерно для рассматриваемых в статье моделей, формула (10) близка к обобщению (11) на случай $\|x_i\| > 0$.

Таким образом, задача оценки чувствительности (локальной) к возмущению параметра сводится к определению значений (10). Для численного моделирования необходимо генерировать возмущения параметра методом Монте–Карло и проводить статистическую оценку распределения отклонений отклика и чувствительности по (10) при различных законах распределения параметров. Входными данными \mathbf{x} , в контексте записи (9), для обсуждаемых многоуровневых моделей являются приведенные выше параметры, характеризующие свойства материала, кинематические воздействия, начальные условия — распределение ориентировок кристаллитов, остаточные напряжения и накопленные сдвиги, имеющиеся

в материале перед началом деформирования. Следует заметить, что в этой статье приводятся результаты исследования чувствительности моделей только по отношению к параметрам свойств, которые представляют собой действительные числа (определены в евклидовом пространстве над полем действительных чисел).

В качестве оператора отклика \mathcal{F} в (9) принимается совокупность истории изменения макронапряжений и ориентировок кристаллитов в представительном макрообъеме для всех рассматриваемых нагружений. В общем случае это понятие можно расширить путем включения в него и других характеристик макроуровня (например, упругих и пластических свойств):

$$\mathcal{F}(\mathbf{X}) = \{F(\mathbf{X})^{(1)}, F(\mathbf{X})^{(2)}, \dots, F(\mathbf{X})^{(Load)}\}, \tag{12}$$

$$F(\mathbf{X})^{(load)} = \left\{ \Sigma(t) \Big|_{t \in [0, T]}, \mathbf{q}^{(i)}(t) \Big|_{t \in [0, T]}, i = 1, \dots, N \right\}, \quad load = 1, \dots, Load,$$

где $\mathbf{q}^{(i)}$ — нормированный кватернион ориентации кристаллографической системы координат i -го кристаллита, соответствующий тензору ориентации $\mathbf{o}^{(i)}$, N — число кристаллитов в представительном объеме макроуровня, T — время окончания процесса, $Load$ — число рассматриваемых видов нагружений (приведены в разделе 2), истории изменений $\Sigma(t), \mathbf{q}^{(i)}(t)$ для каждого вида нагружения (теста) получены при использовании в модели набора параметров \mathbf{X} . Отметим, что количество тестов и их виды могут быть установлены, исходя из информации о наиболее характерных нагружениях, присущих конкретным технологическим процессам. Для числа $[Load]$ тестируемых видов нагружений определим отклик (12) как траекторию в пространстве, представляющую собой декартово произведение из $[Load]$ одинаковых пространств. Каждое из них, в свою очередь, является декартовым произведением двух пространств. Первое представляет собой декартово произведение трехмерных евклидовых пространств (в нем определен тензор макронапряжений), второе — декартово произведение N пространств кватернионов поворотов трехмерного евклидова пространства (в нем определены ориентировки N кристаллитов).

Норму оператора введем следующим образом (по Чебышеву):

$$\|\mathcal{F}(\mathbf{X})\| = \max_{load=1, \dots, Load} \left\| F(\mathbf{X})^{(load)} \right\| = \max_{load=1, \dots, Load} \left(\max_{t \in [0, T]} \left| \Sigma(t)^{(load)} \right| / \Sigma_{\text{хар}} + \max_{\substack{t \in [0, T] \\ i=1, \dots, N}} \left| \mathbf{q}^{(i)}(t)^{(load)} \right| \right),$$

где $\Sigma_{\text{хар}}$ — характерное напряжение, обеспечивающее «равноправие» слагаемых. В расчетах принято:

$$\Sigma_{\text{хар}} = 100 \text{ МПа}; \quad |\Sigma| = \sqrt{\Sigma_{ij}^2}; \quad |\mathbf{q}| = \sqrt{q_i^2}.$$

Для отыскания значения (11) запишем выражение для отклонения отклика

$$\mathcal{F}(\mathbf{X}|_{X_i + \delta X_i^*}) - \mathcal{F}(\mathbf{X}|_{X_i}) = \left\{ \left(F(\mathbf{X}|_{X_i + \delta X_i^*}) - F(\mathbf{X}|_{X_i}) \right)^{(1)}, \dots, \left(F(\mathbf{X}|_{X_i + \delta X_i^*}) - F(\mathbf{X}|_{X_i}) \right)^{(Load)} \right\},$$

$$\left(F(\mathbf{X}|_{X_i + \delta X_i^*}) - F(\mathbf{X}|_{X_i}) \right)^{(load)} = \left\{ \begin{array}{l} \Sigma(t) \Big|_{t \in [0, T]} \Big|_{X_i + \delta X_i^*} - \Sigma(t) \Big|_{t \in [0, T]} \Big|_{X_i}, \\ \mathbf{q}^{(i)}(t) \Big|_{t \in [0, T]} \Big|_{X_i + \delta X_i^*} - \mathbf{q}^{(i)}(t) \Big|_{t \in [0, T]} \Big|_{X_i}, \quad i = 1, \dots, N \end{array} \right\}, \quad load = 1, \dots, Load,$$

норма которого имеет вид:

$$\left\| \mathcal{F}(\mathbf{X}|_{X_i + \delta X_i^*}) - \mathcal{F}(\mathbf{X}|_{X_i}) \right\| = \max_{load=1, \dots, Load} \left\| \left(F(\mathbf{X}|_{X_i + \delta X_i^*}) - F(\mathbf{X}|_{X_i}) \right)^{(load)} \right\| =$$

$$= \max_{load=1, \dots, Load} \left(\begin{array}{l} \max_{t \in [0, T]} \left| \Sigma(t) \Big|_{t \in [0, T]} \Big|_{X_i + \delta X_i^*} - \Sigma(t) \Big|_{t \in [0, T]} \Big|_{X_i} \right| / \Sigma_{\text{хар}} + \\ + \max_{\substack{t \in [0, T] \\ i=1, \dots, N}} \left| \mathbf{q}^{(i)}(t) \Big|_{t \in [0, T]} \Big|_{X_i + \delta X_i^*} - \mathbf{q}^{(i)}(t) \Big|_{t \in [0, T]} \Big|_{X_i} \right| \end{array} \right).$$

Представленная методика позволяет оценить меру воздействия возмущений параметров на получаемый в модели отклик. При этом принимается во внимание вся история изменения отклика, а не только его значение в конкретный момент времени. В такой ситуации требуются значительные вычислительные ресурсы, поэтому на данном этапе не рассматривается перекрестное влияние параметров, то есть приведенные оценки локальны по отношению к многообразию взаимодействий параметров.

Для проведения глобального анализа чувствительности [14, 16] необходимо учитывать все возможные отклонения всех допустимых параметров и находить дисперсии отклонений отклика от значения, отвечающего их фиксированным величинам. Общее количество вычислительных экспериментов получится чрезвычайно большим, что с учетом принятого выше толкования отклика потребует огромных вычислительных затрат. Таким образом, пока ограничимся исследованием чувствительности в рамках описанной методики.

Дополнительно, в качестве иллюстрирующего расширение методики примера, в следующем разделе оценим устойчивость модели к совместному возмущению двух параметров.

4. Результаты оценки чувствительности конститутивных моделей

Поскольку упругие модули материалов определяются в многочисленных экспериментах и достаточно точно, они исключены из числа варьируемых параметров. Возмущения задавались по равномерному закону распределения отдельно для каждого параметра с несколькими диапазонами изменения в пределах 1–5% от его номинального значения, приведенного в разделе 2. Для нанесения каждой точки на каждый нижеприведенный график (для значения аргумента 1, 2, 3, 4, 5%) использовались числовые данные 40 реализаций.

Для базовой модели рассматривалась чувствительность к обозначенным выше шести характеристикам: параметрам вязкопластического соотношения $\dot{\gamma}_0$ (обозначен далее как параметр x_1); m (обозначен как x_2); параметрам закона упрочнения h_0 (x_3); τ_{sat} (x_4); a (x_5); начальным значениям критических напряжений для всех систем скольжения τ_{c0} (x_6).

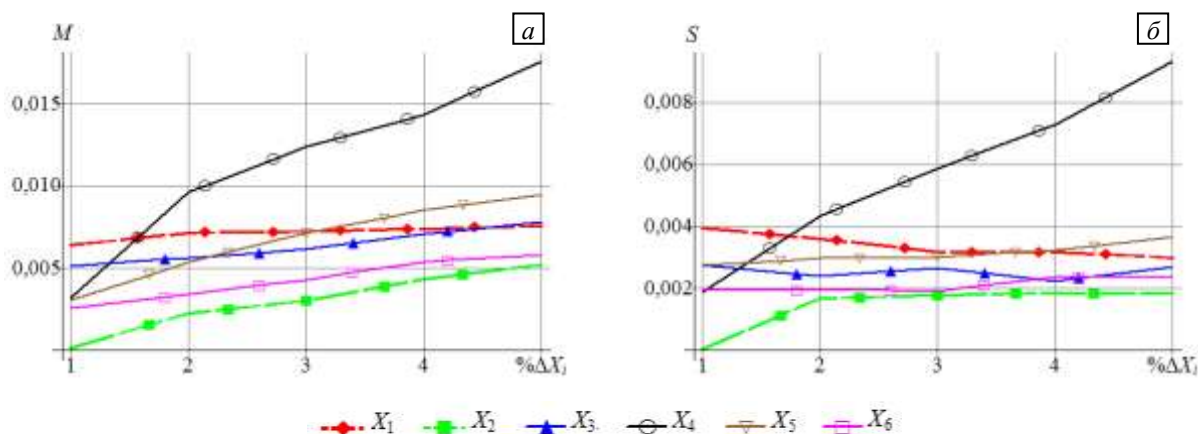


Рис. 7. Статистические оценки в зависимости от диапазона отклонений параметра, полученные с использованием базовой модели (1)–(4), математического ожидания (среднего по реализациям) $M = M \left(\left(\frac{\mathcal{F}(\mathbf{x}|_{x_i+\delta x_i}) - \mathcal{F}(\mathbf{x}|_{x_i})}{\mathcal{F}(\mathbf{x}|_{x_i})} \right) \right)$ (а) и среднеквадратичного отклонения $S = S \left(\left(\frac{\mathcal{F}(\mathbf{x}|_{x_i+\delta x_i}) - \mathcal{F}(\mathbf{x}|_{x_i})}{\mathcal{F}(\mathbf{x}|_{x_i})} \right) \right)$ (б)

На рисунке 7 показаны характеристики полученного в расчетах распределения нормы разности откликов модели со случайными возмущенными и невозмущенными параметрами, отнесенной к норме последнего. Результаты свидетельствуют об устойчивости базовой двухуровневой модели к возмущениям выбранных параметров: малые отклонения воздействий на них приводят к малым отклонениям отклика (при возмущении параметров в пределах 5% отклонение отклика не превышает 3,34% для x_4 , 1,8% — для остальных параметров). Наибольшее влияние на выходные данные оказывает отклонение параметра τ_{sat} (x_4), характеризующего критическое напряжение внутризеренных сдвигов «при насыщении»; этот эффект обусловлен тем, что максимальные (хотя и небольшие) отличия напряжений и ориентировок в большинстве случаев наблюдаются в финале процесса деформирования, когда касательные напряжения по системам скольжения управляются, в первую очередь, значением τ_{sat} .

На рисунке 8 приведены результаты оценки чувствительности модели как относительного изменения отклика к относительному изменению параметров (10). Согласно рисунку модель наиболее чувствительна к параметру τ_{sat} (x_4) и характерной скорости сдвигов $\dot{\gamma}_0$ (x_1), наименее — к скоростной чувствительности m (x_2): при 1%-ном диапазоне отклонения этого параметра оценки отклонения отклика составляют (см. Рис.7) $M = 1,61 \cdot 10^{-4}$, $S = 5,7 \cdot 10^{-5}$. Последнее обусловлено тем, что при довольно

большом номинальном значении $m = 83,33$ изображающие точки в пространстве напряжений для кристаллитов находятся в окрестности поверхности текучести [51, 52]; малые отклонения m от номинального значения почти не влияют на расстояние от поверхности текучести.

Таким образом, чувствительность модели ко всем параметрам можно признать низкой, что, вероятно, связано с общим характером изменения напряжений при деформировании — во-первых, зависимость интенсивности напряжений от накопленной деформации (результаты см. в разделе 2) можно аппроксимировать степенной функцией с показателем степени, меньшим 1, а во-вторых, модель существенно нелинейна и потому мало чувствительна к изменению отдельного параметра. Некоторое понижение $M(A_{x_i})$ и $S(A_{x_i})$ для отдельных параметров при увеличении диапазона отклонения связано с тем, что при рассмотрении расширенных диапазонов изменения параметра, наряду с появлением реализаций с более заметным отклонением отклика от отклика для невозмущенных параметров, также возрастает и число реализаций с откликом, который близок к отклику для невозмущенных параметров. Это обусловлено, в частности, стремлением изображающих точек в пространстве напряжений для кристаллитов находиться в окрестности поверхности текучести, и изменение параметров (кроме x_4 , определяющего финальную поверхность текучести) после некоторого их увеличения уже не может значительно влиять на изменение отклика.

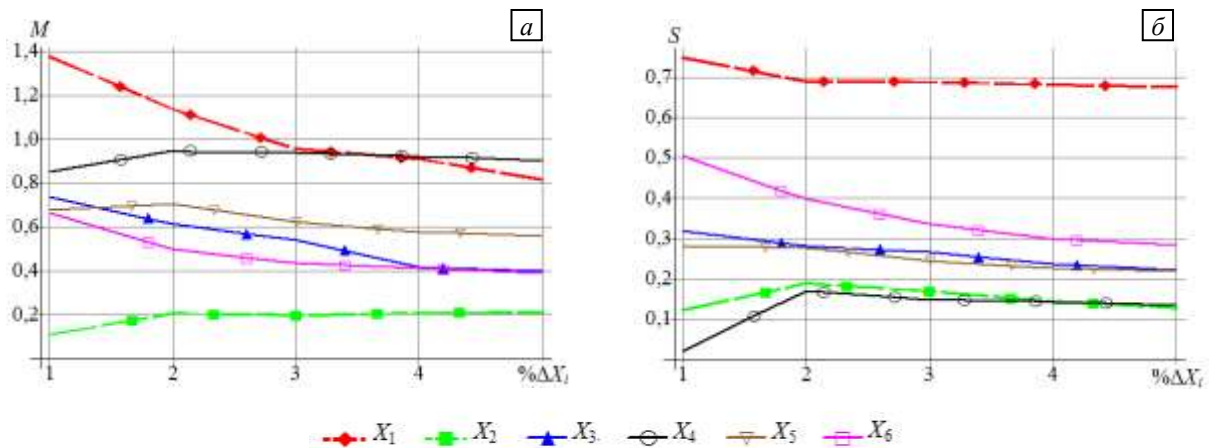


Рис. 8. Статистические оценки чувствительности A_{x_i} (10) для базовой модели (1)–(4) в зависимости от диапазона отклонений параметров $M = M(A_{x_i})$ (а) и $S = S(A_{x_i})$ (б)

Рисунок 9 содержит характеристики полученного в расчетах распределения нормы разности отклика модели со случайными возмущенными параметрами и отклика с невозмущенными параметрами, отнесенной к норме последнего, а рисунок 10 — статистические оценки чувствительности модели к возмущению параметров $m(x_2)$ и $\tau_{c0}(x_6)$ как совместно, так и по отдельности (результаты для последних идентичны приведенным на рисунках 7, 8). Под относительным отклонением « $\% \Delta X$ » понимается оценка при совместном — $|\Delta X|/\|X\| = \sqrt{(\Delta X_2/X_2)^2 + (\Delta X_6/X_6)^2}$, и раздельном — $|\Delta X|/\|X\| = |\Delta X_i|/|X_i|$, \sum_i возмущении параметров, где i и x_i — номер варьируемого параметра и его номинальная величина, Δx_i — отклонение значения параметра в рассматриваемой реализации от своей номинальной величины.

По результатам на рисунках 9, 10 можно заключить, что совместное варьирование параметров оказывает более заметное влияние на отклик, что связано с существенной нелинейностью математической модели, но при этом отклонение отклика от полученного при номинальных значениях параметров остается малым (при их возмущении в пределах 5% отклонение отклика не превышает 1,5%).

Для расширенной трехуровневой модели была рассмотрена чувствительность к четырем характеристикам: к параметрам вязкопластического соотношения $\dot{\gamma}_0(x_1)$, $m(x_2)$ — для внутризеренных сдвигов; к начальному значению критических напряжений $\tau_{cgb0}(x_7)$ и параметру скоростной чувствительности $n(x_8)$ — для межзеренных сдвигов.

Характеристики расчетного распределения нормы разности отклика модели со случайными возмущенными параметрами и отклика с невозмущенными параметрами, отнесенной к норме последнего, приведены на рисунке 11.

Важно отметить, что полученные результаты свидетельствуют об устойчивости трехуровневой модели к возмущениям параметров (при возмущении параметров в пределах 5% отклонение отклика не превышает 4,2% для x_7 , 3,3% — для остальных параметров). Отклик трехуровневой модели существенно зависит от подмодели описания зернограничного скольжения. Согласно данным (см. Рис. 11) наибольшее влияние на него оказывает начальное значение критических напряжений межзеренных сдвигов $\tau_{cgb0} (X_7)$.

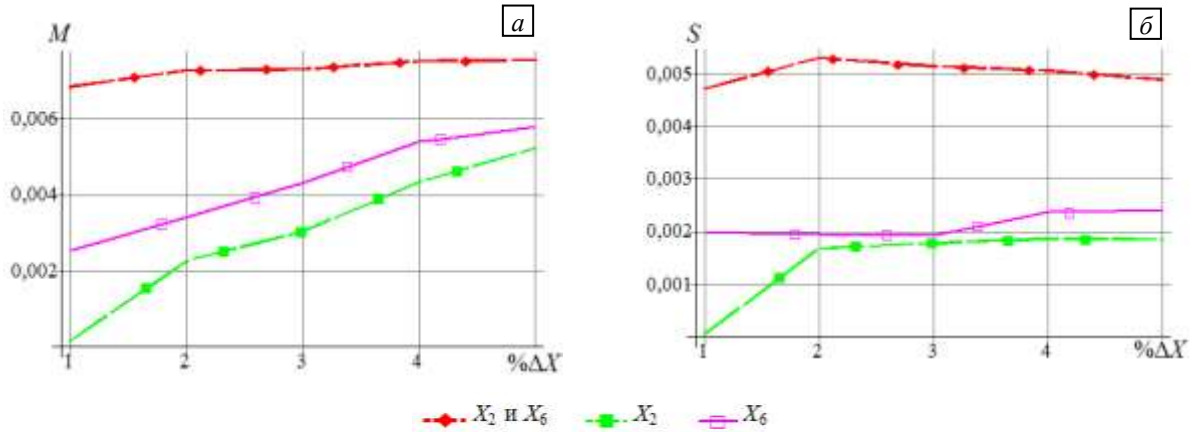


Рис. 9. Статистические оценки в зависимости от диапазона отклонений параметра/параметров, полученные с использованием базовой модели (1)–(4): $M = M \left(\left(\frac{\|\mathcal{F}(\mathbf{x}|_{x_i+\delta x_i}) - \mathcal{F}(\mathbf{x}|_{x_i})\|}{\|\mathcal{F}(\mathbf{x}|_{x_i})\|} \right) \right)$ (а), $S = S \left(\left(\frac{\|\mathcal{F}(\mathbf{x}|_{x_i+\delta x_i}) - \mathcal{F}(\mathbf{x}|_{x_i})\|}{\|\mathcal{F}(\mathbf{x}|_{x_i})\|} \right) \right)$ (б)

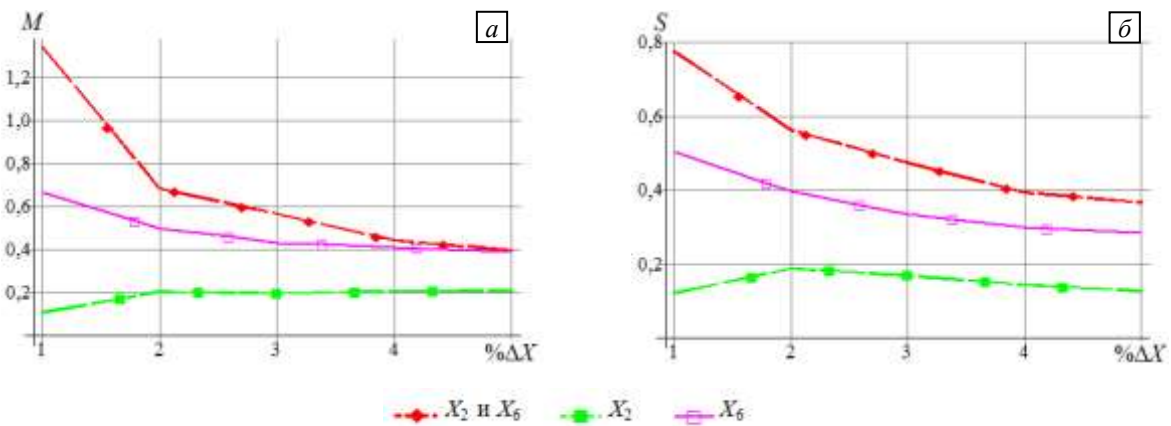


Рис. 10. Статистические оценки чувствительности A_{x_i} по (10) базовой модели (1)–(4) в зависимости от диапазона отклонений параметров: $M = M(A_{x_i})$ (а), $S = S(A_{x_i})$ (б)

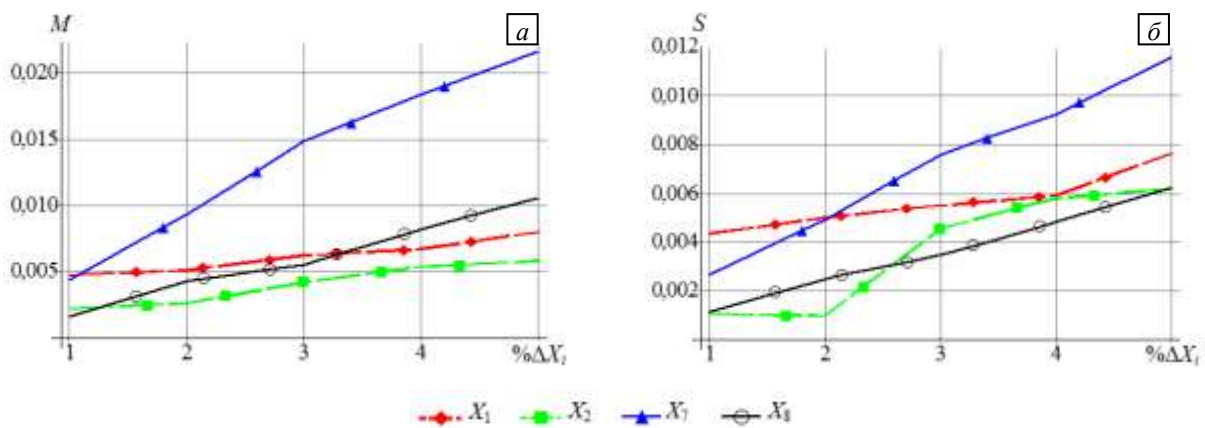


Рис. 11. Статистические оценки в зависимости от диапазона отклонений параметра/параметров, полученные с применением трехуровневой модели с подмоделью зернограничного скольжения (6)–(8): $M = M \left(\left(\frac{\|\mathcal{F}(\mathbf{x}|_{x_i+\delta x_i}) - \mathcal{F}(\mathbf{x}|_{x_i})\|}{\|\mathcal{F}(\mathbf{x}|_{x_i})\|} \right) \right)$ (а), $S = S \left(\left(\frac{\|\mathcal{F}(\mathbf{x}|_{x_i+\delta x_i}) - \mathcal{F}(\mathbf{x}|_{x_i})\|}{\|\mathcal{F}(\mathbf{x}|_{x_i})\|} \right) \right)$ (б)

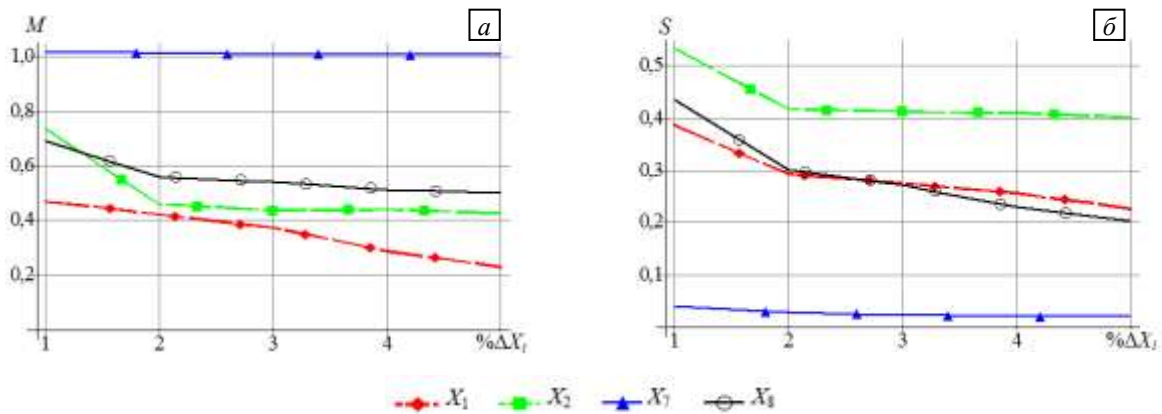


Рис. 12. Статистическая оценка чувствительности A_{x_i} согласно (10) трехуровневой модели с подмоделью зернограничного скольжения (6)–(8) в зависимости от диапазона отклонений параметра: $M = M(A_{x_i})$ (a), $S = S(A_{x_i})$ (б)

На рисунке 12 приведены данные статистической оценки чувствительности модели по формуле (10) как относительного изменения отклика, поделенного на относительное изменение параметра.

Анализируя рисунки 11, 12, можно констатировать:

- модель показывает наибольшую чувствительность к параметру τ_{cgb0} (X_7);
- статистические характеристики отклонения практически не зависят от диапазона возмущений параметра, что связано с выбором номинальных параметров, обеспечивающих стабилизацию напряжения течения на значениях, существенно меньших получаемых в модели без рассмотрения зернограничного скольжения (Рис. 5);
- напряжения течения в значительной мере определяются именно параметром τ_{cgb0} (X_7);
- влияние параметра скоростной чувствительности n для межзеренных сдвигов (X_8) сопоставимо с влиянием параметров описания внутризеренного скольжения (X_1 , X_2);
- поскольку за счет реализации зернограничного скольжения происходит дополнительная релаксация напряжений, отклик уже в меньшей степени зависит от параметра τ_{sat} , характеризующего критическое напряжение внутризеренных сдвигов «при насыщении» (это находит отражение в бóльшей зависимости отклонения отклика от возмущений других параметров внутризеренного скольжения). В частности, в трехуровневой модели наблюдается отклик на изменение параметра скоростной чувствительности m для внутризеренных сдвигов (X_2), более заметный по сравнению с откликом двухуровневой модели (проявляется в увеличении по сравнению с рисунком 8 значений статистических оценок чувствительности, приведенных на рисунке 12).

5. Заключение

Представлена методика оценки чувствительности многоуровневых конститутивных моделей материалов к возмущениям собственных параметров, основанная на интегральном сопоставлении историй откликов, получаемых по возмущенным и невозмущенным наборам этих материальных параметров для нескольких видов нагружений. Под откликом понимаются как изменяющиеся в процессе нагружения параметры напряженно-деформированного состояния на макромасштабном уровне, так и характеристики структуры материала (ориентировки кристаллитов, составляющих представительный объем макроуровня).

С использованием методики исследованы двухуровневая статистическая модель поликристаллических металлов (включающая подмодели внутризеренного дислокационного скольжения и ротаций решеток кристаллитов), а также ее модификация — трехуровневая модель, дополнительно принимающая во внимание механизм зернограничного скольжения.

Результаты вычислений свидетельствуют об устойчивости рассмотренных математических моделей по отношению к изменению их параметров. Это свидетельствует о перспективности приложения многоуровневых моделей материалов к описанию технологических процессов термомеханической обработки, поскольку исключается необходимость проведения для каждого частного случая точной экспериментальной идентификации свойств материала конкретного изделия. На основе выполненного анализа осуществлено ранжирование параметров моделей по степени чувствительности к их возмущениям.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант №17-19-01292).

Литература

1. Физическая мезомеханика и компьютерное конструирование материалов / Под ред. В.Е. Панина. – Новосибирск: Наука, 1995. – Т. 1. – 298 с., Т. 2. – 320 с.
2. *Ghoniem N.M., Busso E.P., Kioussis N., Huang H.* Multiscale modelling of nanomechanics and micromechanics: an overview // *Phil. Mag.* – 2003. – Vol. 83, No. 31-34. – P. 3475-3528. DOI
3. *McDowell D.L.* A perspective on trends in multiscale plasticity // *Int. J. Plast.* – 2010. – Vol. 26, no. 9. – P. 1280-1309. DOI
4. *Трусов П.В., Швейкин А.И.* Многоуровневые физические модели моно- и поликристаллов. Статистические модели // *Физ. мезомех.* – 2011. – Т. 14, № 4. – С. 17-28.
5. *Трусов П.В., Швейкин А.И.* Многоуровневые физические модели моно- и поликристаллов. Прямые модели // *Физ. мезомех.* – 2011. – Т. 14, № 5. – С. 5-30.
6. *Guo Y.B., Wen Q., Horstemeyer M.F.* An internal state variable plasticity-based approach to determine dynamic loading history effects on material property in manufacturing processes // *Int. J. Mech. Sci.* – 2005. – Vol. 47, no. 9. – P. 1423-1441. DOI
7. *Трусов П.В., Ашихмин В.Н., Волегов П.С., Швейкин А.И.* Определяющие соотношения и их применение для описания эволюции микроструктуры // *Физ. мезомех.* – 2009. – Т. 12, № 3. – С. 61-71.
8. *Saï K.* Multi-mechanism models: present state and future trends // *Int. J. Plast.* – 2011. – Vol. 27, no. 2. – P. 250-281. DOI
9. *Maugin G.A.* The saga of internal variables of state in continuum thermo-mechanics (1893-2013) // *Mech. Res. Comm.* – 2015. – Vol. 69. – P. 79-86. DOI
10. *Трусделл К.* Первоначальный курс рациональной механики сплошных сред. – М.: Мир. – 1975. – 592 с.
11. *Ильюшин А.А.* Пластичность. Основы общей математической теории. – М.: АН СССР, 1963. – 272 с.
12. *Лихачев В.А., Малинин В.Г.* Структурно-аналитическая теория прочности. – СПб.: Наука, 1993. – 471 с.
13. *Ломакин Е.В.* Механика сред с зависящими от вида напряженного состояния свойствами // *Физ. мезомех.* – 2007. – Т. 10, № 5. – С. 41-52.
14. *Соболь И.М.* Глобальные показатели чувствительности для изучения нелинейных математических моделей // *Мат. моделирование.* – 2005. – Т. 17, № 9. – С. 43-52.
15. *Saltelli A., Ratto M., Tarantola S., Campolongo F.* Sensitivity analysis practices: strategies for model-based inference // *Reliab. Eng. Syst. Saf.* – 2006. – Vol. 91. – P. 1109-1125. DOI
16. *Saltelli A., Ratto M., Andres T., Campolongo F., Cariboni J., Gatelli D., Saisana M., Tarantola S.* Global sensitivity analysis. The Primer. – England: John Wiley & Sons Ltd. – 2008. – 292 p.
17. *Башкирцева И.А., Ряшко Л.Б., Цветков И.Н.* Стохастическая чувствительность равновесий и циклов одномерных дискретных отображений // *Изв. вузов. ПНД.* – 2009. – Т. 17, № 6. – С. 74-85.
18. *Хворова Л.А.* Методы исследования чувствительности моделей продуктивности агроэкосистем // *Изв. АлтГУ.* – 2013. – № 1-1 (77). – С. 128-132.
19. *Аеошков В.И., Пармузин Е.И., Шутяев В.П.* Ассимиляция данных наблюдений в задаче циркуляции Черного моря и анализ чувствительности ее решения // *Изв. РАН. Физ. атм. и ок.* – 2013. – Т. 49, № 6. – С. 643-654. DOI
20. *Нурисламова Л.Ф., Губайдуллин И.М.* Редукция детальных схем химических превращений окислительных реакций формальдегида и водорода на основании результатов анализа чувствительности математической модели // *Вычислительные методы и программирование.* – 2014. – Т. 15, № 4. – С. 685-696.
21. *Хог Э., Чой К., Комков В.* Анализ чувствительности при проектировании конструкций. – М.: Мир, 1988. – 428 с.
22. *Kleiber M., Hien T.D., Postek E.* Incremental finite element sensitivity analysis for non-linear mechanics applications // *Int. J. Numer. Meth. Eng.* – 1994. – Vol. 37, no. 19. – P. 3291-3308. DOI
23. *Gutiérrez M.A., de Borst R.* Simulation of size-effect behaviour through sensitivity analyses // *Eng. Fract. Mech.* – 2003. – Vol. 70, no. 16. – P. 2269-2279. DOI
24. *Khaledi K, Mahmoudi E, Datcheva M, König D, Schanz T.* Sensitivity analysis and parameter identification of a time dependent constitutive model for rock salt // *J. Comput. Appl. Math.* – 2016. – Vol. 293. – P. 128-138. DOI
25. *Yang Z., Elgamal A.* Application of unconstrained optimization and sensitivity analysis to calibration of a soil constitutive model // *Int. J. Numer. Anal. Meth. Geomech.* – 2003. – Vol. 27, no. 15. – P. 1277-1297. DOI
26. *Qu J., Xu B., Jin Q.* Parameter identification method of large macro-micro coupled constitutive models based on identifiability analysis // *CMC.* – 2010. – Vol. 20, no. 2. – P. 119-157. DOI
27. *Bronkhorst C.A., Kalidindi S.R., Anand L.* Polycrystalline plasticity and the evolution of crystallographic texture in FCC metals // *Phil. Trans. Math. Phys. Eng. Sci.* – 1992. – Vol. 341, no. 1662. – P. 443-477. DOI
28. *Van Houtte P.* Crystal plasticity based modelling of deformation textures // *Microstructure and Texture in Steels / Haldar A., Suwas S., Bhattacharjee D.* (eds). London: Springer. – 2009. – P. 209-224. DOI
29. *Dancette S., Delannay L., Jodkowski T., Giovanola J.* Multisite model prediction of texture induced anisotropy in brass // *Int. J. Mater. Form.* – 2010. – Vol. 3, no. 1. – P. 251-254. DOI
30. *Трусов П.В., Швейкин А.И., Нечаева Е.С., Волегов П.С.* Многоуровневые модели неупругого деформирования материалов и их применение для описания эволюции внутренней структуры // *Физ. мезомех.* – 2012. – Т. 15, № 1. – С. 33-56.
31. *Трусов П.В., Швейкин А.И., Янц А.Ю.* О разложении движения, независимых от выбора системы отсчета производных и определяющих соотношениях при больших градиентах перемещений: взгляд с позиций многоуровневого моделирования // *Физ. мезомех.* – 2016. – Т. 19, № 2. – С. 47-65.
32. *Швейкин А.И., Трусов П.В.* Сопоставление сформулированных в терминах актуальной и разгруженной конфигураций геометрически нелинейных упруговязкопластических определяющих соотношений для кристаллитов // *Физ. мезомех.* – 2016. – Т. 19, № 5. – С. 48-57.
33. *Mandel J.* Equations constitutives et directeurs dans les milieux plastiques et viscoplastiques // *Int. J. Solid. Struct.* – 1973. – Vol. 9, no. 6. – P. 725-740. DOI

34. Gérard C., Cailletaud G., Bacroix B. Modeling of latent hardening produced by complex loading paths in FCC alloys // *Int. J. Plast.* – 2013. – Vol. 42. – P. 194-212. DOI
35. Khadyko M., Dumoulin S., Cailletaud G., Hopperstad O.S. Latent hardening and plastic anisotropy evolution in AA6060 aluminium alloy // *Int. J. Plast.* – 2016. – Vol. 76. – P. 51-74. DOI
36. Anand L. Single-crystal elasto-viscoplasticity: application to texture evolution in polycrystalline metals at large strains // *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.* – 2004. – Vol. 93, no. 48-51. – P. 5359-5383. DOI
37. Швейкин А.И. Многоуровневые модели поликристаллических металлов: сопоставление определяющих соотношений для кристаллитов // ППП. – 2017. – Т. 79, № 4. – С. 385-397.
38. Harder J. FEM-simulation of the hardening behavior of FCC single crystals // *Acta Mech.* – 2001. – Vol. 150, no. 3-4. – P. 197-217. DOI
39. Trusov P.V., Shveykin A.I., Kondratev N.S. Multilevel metal models: formulation for large displacements gradients // *Nanoscience and Technology: An International Journal.* – 2017. – Vol. 8, no. 2. – P. 133-166. DOI
40. Останович К.В., Трусов П.В. Об анизотропии упругих материалов: идентификация симметричных свойств // *Механика композиционных материалов и конструкций.* – 2016. – Т. 22, № 1. – С. 69-84.
41. Мак Лин Д. Границы зерен в металлах. – М.: Государственное научно-техническое издательство литературы по черной и цветной металлургии, 1960. – 322 с.
42. Глейтер Г., Чалмерс Б. Большебугловые границы зерен. – М.: Мир, 1975. – 376 с.
43. Орлов А.Н., Перевезенцев В.Н., Рыбин В.В. Границы зерен в металлах. – М.: Металлургия, 1980. – 156 с.
44. Чувильдеев В.Н. Неравновесные границы зерен в металлах. Теория и приложения. – М.: Физматлит, 2004. – 304 с.
45. Панин В.Е., Егорушкин В.Е., Елсукова Т.Ф. Физическая мезомеханика зернограничного скольжения в деформируемом поликристалле // *Физ. мезомех.* – 2011. – Т. 14, № 6. – С. 15-22.
46. Shveykin A.I., Sharifullina E.R. Development of multilevel models based on crystal plasticity: description of grain boundary sliding and evolution of grain structure // *Nanoscience and Technology: An International Journal.* – 2015. – Vol. 6, no. 4. – P. 281-298. DOI
47. Sharifullina E.R., Shveykin A.I., Trusov P.V. Multilevel model of polycrystalline materials: grain boundary sliding description // *IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng.* – 2017. – Vol. 286. – 012026. DOI
48. Trusov P.V., Sharifullina E.R., Shveykin A.I. Three-level modeling of fcc polycrystalline inelastic deformation: grain boundary sliding description // *IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng.* – 2015. – Vol. 71. – 012081. DOI
49. Bricknell R.H., Edington J.W. Textures in a superplastic Al-6Cu-0.3Zr alloy // *Acta Metall.* – 1979. – Vol. 27, No. 8. – P. 1303-1311. DOI
50. Pérez-Prado M.T., Gonzales-Doncel G. Texture changes during deformation of a 7475 superplastic aluminum sheet alloy // *Textures and Microstructures.* – 2000. – Vol. 34, no. 1. – P. 33-42. DOI
51. Kuhlmann-Wilsdorf D., Kulkarni S.S., Moore J.T., Starke E.A. Deformation bands, the LEDS theory, and their importance in texture development: Part I. Previous evidence and new observations // *Metal. mater. trans. A.* – 1999. – Vol. 30A. – P. 2491-2501. DOI
52. Швейкин А.И., Шарифуллина Э.Р. Анализ конститутивных соотношений для описания внутриверного дислокационного скольжения в рамках двухуровневой упруговязкопластической модели ГЦК-поликристаллов // *Вестник ТГУ.* – 2013. – Т. 18, № 4-2. – С. 1665-1666.

References

1. Panin V.E. (ed.) *Fizicheskaya mezomekhanika i komp'yuternoye konstruirovaniye materialov* [Physical mesomechanics and the computer design of materials]. Novosibirsk: Nauka, 1995. Vol. 1, 298 p., Vol. 2, 320 p.
2. Ghoniem N.M., Busso E.P., Kioussis N., Huang H. Multiscale modelling of nanomechanics and micromechanics: an overview. *Phil. Mag.*, 2003, vol. 83, no. 31-34, pp. 3475-3528. DOI
3. McDowell D.L. A perspective on trends in multiscale plasticity. *Int. J. Plast.*, 2010, vol. 26, no. 9, pp. 1280-1309. DOI
4. Trusov P.V., Shveykin A.I. Multilevel crystal plasticity models of single- and polycrystals. Statistical models. *Phys. Mesomech.*, 2013, vol. 16, no. 1, pp. 23-33. DOI
5. Trusov P.V., Shveykin A.I. Multilevel crystal plasticity models of single- and polycrystals. Direct models. *Phys. Mesomech.*, 2013, vol. 16, no. 2, pp. 99-124. DOI
6. Guo Y.B., Wen Q., Horstemeyer M.F. An internal state variable plasticity-based approach to determine dynamic loading history effects on material property in manufacturing processes. *Int. J. Mech. Sci.*, 2005, vol. 47, no. 9, pp. 1423-1441. DOI
7. Trusov P.V., Ashikhmin V.N., Volegov P.S., Shveykin A.I. Constitutive relations and their application to the description of microstructure evolution. *Phys. Mesomech.*, 2010, vol. 13, no. 1-2, pp. 38-46. DOI
8. Sai K. Multi-mechanism models: present state and future trends. *Int. J. Plast.*, 2011, vol. 27, no. 2, pp. 250-281. DOI
9. Maugin G.A. The saga of internal variables of state in continuum thermo-mechanics (1893-2013). *Mech. Res. Comm.*, 2015, vol. 69, pp. 79-86. DOI
10. Truesdell C. *A first course in rational continuum mechanics*. USA, Maryland, Baltimore, The Johns Hopkins University, 1972. 304 p.
11. И'юшин А.А. Пластичность. Основы общечей математической теории. – М.: АН СССР [Plasticity. Fundamentals of the general mathematical theory]. – Moscow: AN SSSR, 1963. – 272 p.
12. Лихачев В.А., Малинин В.Г. *Структурно-аналитическая теория прочности* [Structural-analytical theory of strength]. – St. Petersburg: Nauka, 1993. – 471 p.
13. Lomakin E.V. Mechanics of media with stress-state dependent properties. *Phys. Mesomech.*, 2007, vol. 10, no. 5-6, pp. 255-264. DOI
14. Sobol I.M. Global'nyye pokazateli chuvstvitel'nosti dlya izucheniya nelineynykh matematicheskikh modeley [Global sensitivity indices for the investigation of nonlinear mathematical models]. *Mat. modelirovanie – Math. modeling*, 2005, vol. 17, no. 9, pp. 43-52.

15. Saltelli A., Ratto M., Tarantola S., Campolongo F. Sensitivity analysis practices: strategies for model-based inference. *Reliab. Eng. Syst. Saf.*, 2006, vol. 91, pp. 1109-1125. DOI
16. Saltelli A., Ratto M., Andres T., Campolongo F., Cariboni J., Gatelli D., Saisana M., Tarantola S. *Global sensitivity analysis. The Primer*. England, John Wiley & Sons Ltd, 2008. 292 p.
17. Bashkirtseva I.A., Ryashko L.B., Tsvetkov I.N. Stokhasticheskaya chuvstvitel'nost' ravnovesiy i tsiklov odnomernykh diskretnykh otobrazheniy [Stochastic sensitivity of equilibrium and cycles of 1d discrete maps]. *Izv. vys. uch. zav. Prikl. nelin. din. – Proc. of high educat. inst. Appl. nonlinear dyn.*, 2009, vol. 17, no. 6, pp. 74-85.
18. Khvorova L.A. Metody issledovaniya chuvstvitel'nosti modeley produktivnosti agroekosistem [The Research on the Sensitivity of Models of Agroecosystems' Productivity]. *Izv. Alt. gos. un. – Proc. of the Altai St. Un.*, 2013, no. 1-1 (77), pp. 128-132.
19. Agoshkov V.I., Parmuzin E.I., Shutyaev V.P. Observational data assimilation in the problem of Black Sea circulation and sensitivity analysis of its solution. *Izvestiya. Atmos. Ocean. Phys.*, 2013, vol. 49, no. 6, pp. 592-602. DOI
20. Nurislamova L.F., Gubaydullin I.M. Reduktsiya detal'nykh skhem khimicheskikh prevrashcheniy oksilitel'nykh reaktsiy formal'degida i vodoroda na osnovanii rezul'tatov analiza chuvstvitel'nosti matematicheskoy modeli [Reduction of detailed schemes of chemical transformations of formaldehyde and hydrogen oxidation reactions based on a sensitivity analysis of a mathematical model]. *Vych. met. i programmirovaniye: novye vych. tekhn. – Comput. meth. and programming: new comput. techn.*, 2014, vol. 15, no. 4, pp. 685-696.
21. Haug E.J., Choi K.K., Komkov V. Design sensitivity analysis of structural systems. Academic Press, 1986. 381 p.
22. Kleiber M., Hien T.D., Postek E. Incremental finite element sensitivity analysis for non-linear mechanics applications. *Int. J. Numer. Meth. Eng.*, 1994, vol. 37, no. 19, pp. 3291-3308. DOI
23. Gutiérrez M.A., de Borst R. Simulation of size-effect behaviour through sensitivity analyses. *Eng. Fract. Mech.*, 2003, vol. 70, no. 16, pp. 2269-2279. DOI
24. Khaledi K, Mahmoudi E, Datcheva M, König D, Schanz T. Sensitivity analysis and parameter identification of a time dependent constitutive model for rock salt. *J. Comput. Appl. Math.*, 2016, vol. 293, pp. 128-138. DOI
25. Yang Z., Elgamal A. Application of unconstrained optimization and sensitivity analysis to calibration of a soil constitutive model. *Int. J. Numer. Anal. Meth. Geomech.*, 2003, vol. 27, No. 15, pp. 1277-1297. DOI
26. Qu J., Xu B., Jin Q. Parameter identification method of large macro-micro coupled constitutive models based on identifiability analysis. *CMC*, 2010, vol. 20, no. 2, pp. 119-157. DOI
27. Bronkhorst C.A., Kalidindi S.R., Anand L. Polycrystalline plasticity and the evolution of crystallographic texture in FCC metals. *Phil. Trans. Math. Phys. Eng. Sci.*, 1992, vol. 341, no. 1662, pp. 443-477. DOI
28. Van Houtte P. Crystal plasticity based modelling of deformation textures // *Microstructure and Texture in Steels* / Haldar A., Suwas S., Bhattacharjee D. (eds). London: Springer, 2009, pp. 209-224. DOI
29. Dancette S., Delannay L., Jodlowski T., Giovanola J. Multisite model prediction of texture induced anisotropy in brass. *Int. J. Mater. Form.*, 2010, vol. 3, no 1, pp. 251-254. DOI
30. Trusov P.V., Shveykin A.I., Nechaeva E.S., Volegov P.S. Multilevel models of inelastic deformation of materials and their application for description of internal structure evolution. *Phys. Mesomech.*, 2012, vol. 15, no. 3-4, pp. 155-175. DOI
31. Trusov P.V., Shveykin A.I., Yanz A.Y. Motion decomposition, frame-indifferent derivatives, and constitutive relations at large displacement gradients from the viewpoint of multilevel modeling. *Phys. Mesomech.*, 2017, vol. 20, no. 4, pp. 357-376. DOI
32. Shveykin A.I., Trusov P.V. Sopostavlenie sformulirovannykh v terminah aktual'noj i razgruzhennoj konfiguracii geometricheski nelinejnykh uprugovyazkoplasticheskikh opredelyayushchih sootnoshenij dlya kristallitov [Correlation between geometrically nonlinear elasto-visco-plastic constitutive relations formulated in terms of the actual and unloaded configurations for crystallites]. *Fizicheskaya mezomekhanika – Physical mesomechanics.*, 2016, vol. 19, no. 5, pp. 48-57.
33. Mandel J. Equations constitutives et directeurs dans les milieux plastiques et viscoplastiques. *Int. J. Solid. Struct.*, 1973, vol. 9, no. 6. pp. 725-740. DOI
34. Gérard C., Cailletaud G., Bacroix B. Modeling of latent hardening produced by complex loading paths in FCC alloys. *Int. J. Plast.*, 2013, vol. 42, pp. 194-212. DOI
35. Khadyko M., Dumoulin S., Cailletaud G., Hopperstad O.S. Latent hardening and plastic anisotropy evolution in AA6060 aluminium alloy. *Int. J. Plast.*, 2016, vol. 76, pp. 51-74. DOI
36. Anand L. Single-crystal elasto-viscoplasticity: application to texture evolution in polycrystalline metals at large strains. *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.*, 2004, vol. 93, no. 48-51, pp. 5359-5383. DOI
37. Shveykin A.I. Mnogourovnevyye modeli polikristallicheskih metallov: sopostavleniye opredelyayushchikh sootnosheniy dlya kristallitov [Multilevel models of polycrystalline metals: comparison of constitutive relations for crystallites]. *Probl. prochnosti i plastichnosti – Probl. of strength and plasticity*, 2017, vol. 79, no. 4, pp. 385-397.
38. Harder J. FEM-simulation of the hardening behavior of FCC single crystals. *Acta Mech.*, 2001, vol. 150, no. 3-4, pp. 197-217. DOI
39. Trusov P.V., Shveykin A.I., Kondratev N.S. Multilevel metal models: formulation for large displacements gradients. *Nanoscience and Technology: An International Journal*, 2017, vol. 8, no. 2, pp. 133-166. DOI
40. Ostapovich K.V., Trusov P.V. Ob anizotropii uprugikh materialov: identifikaciya simmetriynykh svojstv [On elastic anisotropy: symmetry identification]. *Mekhanika kompozitsionnykh materialov i konstrukcii – Mechanics of composite materials and structures*, 2016, vol. 22, no. 1, pp. 69-84.
41. McLean D. *Grain boundaries in metals*. Oxford: Clarendon Press, 1957. 346 p.
42. Gleiter H., Chalmers B. *High-angle grain boundaries*. Oxford: Pergamon Press, 1972. 303 p.
43. Orlov A.N., Perevezentsev V.N., Rybin V.V. *Granitsy zeren v metallakh* [Grain boundaries in metals]. – Moscow, Metallurgiya, 1980. – 156 p.
44. CHuvil'deyev V.N. *Neravnovesnyye granitsy zeren v metallakh. Teoriya i prilozheniya* [Nonequilibrium grain boundaries in metals]. – Moscow, Fizmatlit, 2004. – 304 p

45. Panin V.E., Egorushkin V.E., Elsukova T.F. Physical mesomechanics of grain boundary sliding in a deformable polycrystal. *Phys. Mesomech.*, 2013, vol. 16, no. 1, pp. 1-8. DOI
46. Shveykin A.I., Sharifullina E.R. Development of multilevel models based on crystal plasticity: description of grain boundary sliding and evolution of grain structure. *Nanoscience and Technology: An International Journal*, 2015, vol. 6, no. 4, pp. 281-298. DOI
47. Sharifullina E.R., Shveykin A.I., Trusov P.V. Multilevel model of polycrystalline materials: grain boundary sliding description. *IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng.*, 2017, vol. 286, 012026. DOI
48. Trusov P.V., Sharifullina E.R., Shveykin A.I. Three-level modeling of fcc polycrystalline inelastic deformation: grain boundary sliding description. *IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng.*, 2015, vol. 71, 012081. DOI
49. Bricknell R.H., Edington J.W. Textures in a superplastic Al-6Cu-0.3Zr alloy. *Acta Metall.*, 1979, vol. 27, no. 8, pp. 1303-1311. DOI
50. Pérez-Prado M.T., Gonzales-Doncel G. Texture changes during deformation of a 7475 superplastic aluminum sheet alloy. *Textures and Microstructures*, 2000, vol. 34, no. 1, pp. 33-42. DOI
51. Kuhlmann-Wilsdorf D., Kulkarni S.S., Moore J.T., Starke E.A. jr. Deformation bands, the LEDS theory, and their importance in texture development: Part I. Previous evidence and new observations. *Metal. mater. trans. A.*, 1999, V. 30A, pp. 2491-2501. DOI
52. Shveykin A.I., Sharifullina E.R. *Analiz konstitutivnykh sootnosheniy dlya opisaniya vnutrizerennogo dislokatsionnogo skol'zheniya v ramkakh dvukhurovnevoy uprugovyazkoplasticheskoy modeli GTsK-polikristallov* [Analysis of constitutive relations for intragranular dislocation sliding description within two-level elasto-viscoplastic model of FCC-polycrystals]. *Vestnik Tambovskogo gosudarstvennogo universiteta – Bulletin of Tambov State University*, 2013, vol. 18, no. 4, pp.1665-1666.

Поступила в редакцию 01.06.2018; опубликована в электронном виде 05.07.2018

Сведения об авторах

Швейкин Алексей Игоревич, кфмн, доц., Пермский национальный исследовательский политехнический университет (ПНИПУ), 614990, Пермь, Комсомольский пр., 29; e-mail: alexsh59@bk.ru

Шарифуллина Эльвира Риватовна, спец., ПНИПУ; e-mail: elvira16_90@mail.ru

Трусов Петр Валентинович, дфмн, проф., зав.каф., ПНИПУ; e-mail: tpv@matmod.pstu.ac.ru

Пушиков Дмитрий Алексеевич, студ., ПНИПУ; e-mail: kirintul@gmail.com