

DOI: 10.7242/1999-6691/2012.5.1.6

УДК 539.3

## ДВУХУРОВНЕВАЯ МОДЕЛЬ ДЛЯ ОПИСАНИЯ УПРУГОВЯЗКОПЛАСТИЧЕСКОГО ДЕФОРМИРОВАНИЯ ГПУ–МЕТАЛЛОВ

О.В. Бразгина, П.В. Трусов

*Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь, Россия*

Рассматривается двухуровневая модель, ориентированная на описание процессов деформирования ГПУ-металлов. На макроуровне объектом исследования является представительный объем поликристалла. На мезоуровне используются соотношения физической теории упруговязкопластичности, модифицированные для учета влияния температуры. Предлагается алгоритм реализации модели, анализируются результаты решения задачи одноосного нагружения поликристаллического образца. Проведены идентификация и верификация модели. Результаты находятся в удовлетворительном соответствии с экспериментальными данными.

*Ключевые слова:* двухуровневая упруговязкопластическая модель, ротация решетки, ГПУ металлы, двойникование

## A TWO-LEVEL MODEL FOR DESCRIPTION OF ELASTOVISCOPLASTIC DEFORMATION OF HCP METALS

O.V. Brazgina and P.V. Trusov

*Perm State National Research Polytechnical University, Perm, Russia*

A two-level model for describing deformation processes that take place in hcp metals is considered. At the macro-scale, a representative volume element of polycrystal is studied. At the mesoscale, the equations of physical theory of elastoviscoplasticity modified to take into account the effect of temperature are used. An algorithm to implement this model is proposed. The results obtained in the solution of the uniaxial tension problem are analyzed. The identification and verification of the model are carried out. The numerical results are in satisfactory agreement with the experimental data.

*Key words:* two-scale elastoviscoplastic model, lattice rotation, hcp metals, twinning

### 1. Введение

Процессы неупругого деформирования и свойства поликристаллических материалов на макроуровне существенным образом определяются состоянием мезо- и микроструктуры материала. Однако мезо- и микроструктура, в свою очередь, трансформируются в процессе деформирования. Таким образом, воздействуя на мезо- и микроструктуру, можно получать требуемые свойства материала на макроуровне, в связи с чем на сегодняшний день моделирование процессов, происходящих на мезо- и микроуровне при деформировании представляет собой одну из наиболее актуальных проблем, эффективным инструментом решения которой являются так называемые физические теории пластичности [1]. Существующие в настоящее время физические теории пластичности можно разделить на четыре широких класса: жесткопластические, упругопластические, вязкопластические и упруговязкопластические.

В теориях первого класса получила распространение модель Тейлора [2], в которой рассматривается поликристалл, состоящий из большого числа хаотично (обычно по равномерному закону) ориентированных зерен. Принимается гипотеза Фойгта: деформации (или деформации скорости) полагаются однородными в пределах макроскопического представительного объема. Упрочнение описывается изотропным законом. Любая деформация (или приращение деформации) осуществляется сдвигом не более чем по пяти независимым системам скольжения, определенным из условия минимальности суммарного сдвига. Модель Тейлора сводится к минимизации мощности работы на сдвигах. Эта модель приводит к большому количеству трудностей, таких как неединственность решения задачи, невыполнение условий равновесия на границах зерен, неучет упругих деформаций, возможное несоответствие напряженного состояния виду деформированного состояния [1]. Тем не менее, эта модель в ее различных модификациях широко применяется и в настоящее время.

Упругопластические модели лишены многих недостатков жесткопластических моделей. Однако их главным недостатком является проблема неединственности набора активных систем скольжения и связанный с этим выбор нужного из них при нахождении изображающей точки в пространстве напряжений в вершине 6-го или 8-го порядка многогранника текучести.

Вязкопластические модели, как правило, находят применение для рассмотрения процессов неупругого деформирования при повышенных температурах и медленных нагружениях. В последнее время широкое распространение получили упруговязкопластические модели, которые расширяют классы задач, решаемых

с помощью вязкопластических и упругопластических моделей. Кроме того, обладая основными преимуществами перечисленных выше теорий, они лишены некоторых недостатков, в частности, не возникает проблема неединственности определения скоростей сдвигов. На сегодняшний день существует достаточно много упруговязкопластических моделей, так как указанные преимущества создают почву для их совершенствования. В связи с вышесказанным в настоящей работе будет использоваться именно упруговязкопластическая модель.

Целью работы является модификация и реализация математической модели [3] применительно к представительному объему однофазного поликристаллического металла с гексагональной плотноупакованной (ГПУ) решеткой, позволяющей описывать упругопластическое деформирование с учетом анизотропии свойств материала и изменения температуры при произвольном кинематическом нагружении.

### 2. Особенности деформирования ГПУ–кристаллов

ГПУ-кристаллы характеризуются высокой степенью анизотропии как упругих, так и пластических свойств. Прежде всего, это связано со значительной несимметрией пространственной решетки, выраженной тем сильнее, чем больше отношение параметров кристаллической решетки  $c/a$ , где  $c = AG$ ,  $a = AB$  (Рис. 1). Системы скольжения (СС) в ГПУ-кристаллах резко неравноправны в силу различной плотности упаковки по кристаллографическим направлениям [4]. Основные кристаллографические плоскости для ГПУ-кристаллов показаны на рисунке 1 и перечислены в таблице 1.

Таблица 1. Системы скольжения и двойникования ГПУ-кристаллов

Механизм деформации	Плоскость	Направление	Количество систем
Призматическое скольжение $\langle a \rangle$	$(10\bar{1}0)$	$[11\bar{2}0]$	3
Базисное скольжение $\langle a \rangle$	$(0001)$	$[11\bar{2}0]$	3
Пирамидальное скольжение $\langle a + c \rangle$	$(10\bar{1}1)$	$[11\bar{2}3]$	12
Двойники сжатия	$(11\bar{2}2)$	$[11\bar{2}3]$	6
Двойники растяжения	$(10\bar{1}2)$	$[\bar{1}011]$	6

Наиболее плотноупакованными в ГПУ-кристаллах являются либо базисные ( $c/a > \sqrt{3}$ ), либо призматические плоскости ( $c/a < \sqrt{3}$ ). Зачастую при низких и умеренных температурах ( $T_r < 0,3$ , где  $T_r$  — гомологическая температура, равная отношению текущей абсолютной температуры к температуре плавления) скольжение по пирамидальным плоскостям отсутствует в силу низкой плотности упаковки, что, в свою очередь, приводит к достаточно высоким критическим напряжениям. Так называемые  $\langle c \rangle$ - и  $\langle a + c \rangle$ -скольжения становятся возможными лишь при высоких температурах. В этом случае максимальное число независимых СС равняется четырем (имеют место два линейно независимых направления скольжения в базисной плоскости и два — в призматических плоскостях). Деформация по любой возможной из указанных СС не дает пластических смещений вдоль оси  $c$ , поэтому зерна не в состоянии изменить свои размеры вдоль этого направления. В ГПУ-металлах формоизменение зерен вдоль оси  $c$  осуществляется путем механического двойникования. Будучи в ГПУ-металлах равноправной модой пластичности, оно развивается, начиная с самой ранней стадии деформирования, а не после значительной предшествующей деформации скольжением, как в кристаллах с кубической решеткой.

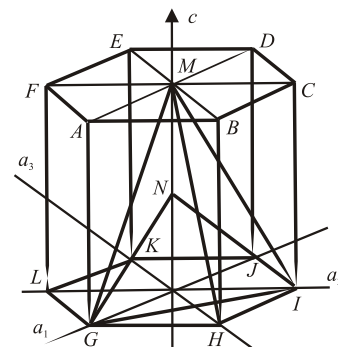


Рис. 1. Кристаллографические плоскости в ГПУ-структуре [5]:  $GHJKL$  – базисная  $(0001)$ ,  $ABHG$  – призматическая  $(10\bar{1}0)$ ,  $GHM$   $(10\bar{1}1)$ ,  $GHN$   $(10\bar{1}2)$ ,  $GIM$   $(11\bar{2}1)$ ,  $GIN$   $(11\bar{2}2)$  – пирамидальные

### 3. Двухуровневая модель упруговязкопластического деформирования

Для процессов деформирования характерна существенная неоднородность распределения по области деформирования возникающих напряжений и деформаций; для их определения необходимо ставить и решать соответствующие краевые задачи [6]. Используемые в постановке определяющие соотношения



Рис. 2. Схема взаимодействия макро- и мезоуровней

в качестве таких элементов в двухуровневых моделях кристаллиты (зерна, субзерна, фрагменты) с приблизительно правильным кристаллическим строением, анизотропными упругими свойствами и набором СС и систем двойникования (СД). Для поликристаллических материалов в качестве представительного объема макроуровня обычно принимается конгломерат, включающий не менее 7 зерен по стороне куба, то есть не менее 343 зерен [8]. Схема взаимодействия моделей макро- и мезоуровня приведена на рисунке 2.

Для того чтобы описать ориентацию кристаллита, необходимо, во-первых, задать его координатную систему, связанную с некоторыми направлениями в кристаллите — кристаллографическую систему координат (КСК)  $\alpha x^1 x^2 x^3$  с ортонормированным базисом  $\mathbf{k}^i$ , и, во-вторых, внешнюю — лабораторную, систему координат (ЛСК)  $O X^1 X^2 X^3$  с ортонормированным базисом  $\mathbf{l}^i$  (обе системы координат — декартовы). В качестве координатных осей КСК возьмем направления  $\alpha x^1 = [10\bar{1}0]$ ,  $\alpha x^2 = [\bar{1}2\bar{1}0]$ ,  $\alpha x^3 = [0001]$ . При этом векторы базисов  $\mathbf{k}^i$  (КСК) и  $\mathbf{l}^i$  (ЛСК) связаны соотношением:

$$\mathbf{k}^i = \mathbf{O} \cdot \mathbf{l}^i \quad (i = \overline{1, 3}), \quad (1)$$

где ортогональный тензор  $\mathbf{O}$ , задающий ориентацию кристаллита относительно ЛСК, представляет собой диадик  $\mathbf{O} = \mathbf{k}^i \mathbf{l}_i$ ; при этом компоненты тензора  $\mathbf{O}$  в обоих базисах будут совпадать:

$$O_{pq} = \mathbf{k}^p \cdot \mathbf{O} \cdot \mathbf{k}^q = \mathbf{k}^p \cdot \mathbf{k}^i \mathbf{l}_i \cdot \mathbf{k}^q = \mathbf{l}_p \cdot \mathbf{k}^q; \quad O_{pq} = \mathbf{l}^p \cdot \mathbf{O} \cdot \mathbf{l}^q = \mathbf{l}^p \cdot \mathbf{k}^i \mathbf{l}_i \cdot \mathbf{l}^q = \mathbf{l}^p \cdot \mathbf{k}^q = \mathbf{l}_p \cdot \mathbf{k}^q. \quad (2)$$

В практических расчетах  $\mathbf{O}$  обычно определяется с помощью углов Эйлера.

Упруговязкопластическая модель базируется на теории термоактивируемого движения дислокаций; в рассматриваемой модели принимаются следующие гипотезы:

1. Представительный объем макроуровня есть поликристалл, состоящий из хаотично ориентированных (начальная ориентация устанавливается соответствующим законом распределения, обычно равномерным) кристаллитов (зерен, субзерен).

2. Границы зерен имеют нулевую толщину, не вносят вклада в механизмы неупругого деформирования.

3. Скорости полных деформаций отдельных кристаллитов поликристалла  $\mathbf{d}_{(n)}$  ( $n = 1, 2, \dots, N$ ) равны скоростям полных деформаций поликристаллического агрегата  $\mathbf{D}$ :  $\mathbf{d}_{(n)} = \mathbf{D}$  (гипотеза Фойгта).

4. Неупругие деформации кристаллитов осуществляются кристаллографическим сдвигом по известным для данного материала кристаллографическим СС и СД.

5. Скорости полных деформаций каждого из кристаллитов поликристаллического агрегата представляются суммой упругих и пластических составляющих, которые, в свою очередь, определяются скольжением дислокаций и двойникованием:

$$\mathbf{d}_{(n)} = \mathbf{d}_{(n)}^e + \mathbf{d}_{(n)}^p = \mathbf{d}_{(n)}^e + \mathbf{d}_{(n)slip}^p + \mathbf{d}_{(n)twinn}^p = \mathbf{D},$$

где  $\mathbf{d}_{(n)slip}^p$ ,  $\mathbf{d}_{(n)twinn}^p$  — составляющие неупругих скоростей деформации, реализуемые за счет скольжения дислокаций и двойникования, соответственно. Здесь и далее заглавные буквы обозначают величины макроуровня, а аналогичные строчные — соответствующие им величины мезоуровня.

формулируются для представительного объема макроуровня, который служит элементом верхнего уровня в двухуровневых моделях; для материалов первого порядка [7] напряженно-деформированное состояние (НДС) и свойства материала полагаются однородными в пределах представительного макрообъема и находятся осреднением соответствующих параметров нижележащего масштабного уровня (мезоуровня). Элементами мезоуровня являются области однородного НДС и свойств в терминах характеристик мезоуровня (мезонапряжений, мезодеформаций и так далее). Как правило, формулируются для представительного объема макроуровня, который служит элементом верхнего уровня в двухуровневых моделях; для материалов первого порядка [7] напряженно-деформированное состояние (НДС) и свойства материала полагаются однородными в пределах представительного макрообъема и находятся осреднением соответствующих параметров нижележащего масштабного уровня (мезоуровня). Элементами мезоуровня являются области однородного НДС и свойств в терминах характеристик мезоуровня (мезонапряжений, мезодеформаций и так далее). Как правило,

Рассмотрим модель мезоуровня; заметим, что хотя полные градиенты места и деформации скорости, согласно гипотезе Фойгта, полагаются равными в каждый момент деформирования для всех кристаллитов, входящих в представительный макрообъем, упругие и неупругие составляющие отличаются от кристаллита к кристаллиту; в дальнейшем для упрощения записи индекс  $n$ , указывающий на номер кристаллита, опускается. В качестве исходного кинематического соотношения используется мультипликативное разложение градиента места (Рис. 3):  $\mathbf{f} = \mathbf{f}^* \cdot \mathbf{f}^p$ , где тензор  $\mathbf{f}^*$  описывает как упругое деформирование, так и квазижесткие повороты,  $\mathbf{f}^p$  определяется сдвигами по кристаллографическим СС и СД.

Напомним, что градиент места является линейным оператором, который осуществляет взаимно однозначное отображение элементарных материальных отрезков в начальной конфигурации  $d\mathbf{R}$  в те же отрезки в текущей конфигурации  $d\mathbf{r}$ :  $d\mathbf{r} = \mathbf{f} \cdot d\mathbf{R}$ .

Запишем градиент скорости перемещений:

$$\begin{aligned} \mathbf{l} = \dot{\mathbf{f}} \cdot \mathbf{f}^{-1} &= (\dot{\mathbf{f}}^* \cdot \mathbf{f}^p + \mathbf{f}^* \cdot \dot{\mathbf{f}}^p) \cdot (\mathbf{f}^* \cdot \mathbf{f}^p)^{-1} = \dot{\mathbf{f}}^* \cdot \mathbf{f}^p \cdot (\mathbf{f}^p)^{-1} \cdot \mathbf{f}^{*-1} + \mathbf{f}^* \cdot \dot{\mathbf{f}}^p \cdot (\mathbf{f}^p)^{-1} \cdot \mathbf{f}^{*-1} = \\ &= \dot{\mathbf{f}}^* \cdot \mathbf{f}^{*-1} + \mathbf{f}^* \cdot \dot{\mathbf{f}}^p \cdot (\mathbf{f}^p)^{-1} \cdot \mathbf{f}^{*-1} \end{aligned} \quad (3)$$

и введем обозначения для его составляющих:  $\dot{\mathbf{f}}^* \cdot \mathbf{f}^{*-1} = \mathbf{l}^*$ ,  $\mathbf{f}^* \cdot \dot{\mathbf{f}}^p \cdot (\mathbf{f}^p)^{-1} \cdot \mathbf{f}^{*-1} = \mathbf{l}^p$ ,  $\dot{\mathbf{f}}^p \cdot (\mathbf{f}^p)^{-1} = \mathbf{l}^{p*}$ , где  $\mathbf{l}^*$ ,  $\mathbf{l}^{p*}$ ,  $\mathbf{l}^p$  — соответственно упругая, пластическая в промежуточной конфигурации и пластическая в текущей конфигурации составляющие. Таким образом, в текущей конфигурации градиент скорости перемещений примет вид:  $\nabla \mathbf{v}^T = \mathbf{l} = \mathbf{l}^* + \mathbf{l}^p = \mathbf{l}^* + \mathbf{f}^* \cdot \mathbf{l}^{p*} \cdot \mathbf{f}^{*-1}$  ( $\Gamma$  — знак операции транспонирования).

Для описания упругого поведения монокристалла воспользуемся законом Гука в скоростной релаксационной форме:  $\dot{\boldsymbol{\sigma}}^r = \mathbf{c} : (\mathbf{d} - \mathbf{d}^p)$ , где  $\mathbf{c}$  — анизотропный тензор четвертого ранга упругих свойств монокристалла;  $\dot{\boldsymbol{\sigma}}^r = \dot{\boldsymbol{\sigma}} - \boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\omega}$  — коротационная производная, связанная со спином  $\boldsymbol{\omega}$ , характеризующим скорость вращения кристаллической решетки;  $\boldsymbol{\sigma}$  — тензор напряжений Коши. Тензор спина определим с помощью модели стесненного поворота по Тейлору:

$$\boldsymbol{\omega} = \mathbf{w} - \mathbf{w}^p, \quad (4)$$

где  $\mathbf{w}$  — тензор вихря,  $\mathbf{w} = \left( \left( \hat{\nabla} \mathbf{v} \right)^T - \hat{\nabla} \mathbf{v} \right) / 2 = (\mathbf{l} - \mathbf{l}^T) / 2$ ,  $\mathbf{w}^p$  — антисимметричная составляющая  $\mathbf{l}^p$ .

Пластическую составляющую градиента скорости перемещений в промежуточной конфигурации представим в виде:

$$\mathbf{l}^{p*} = \dot{\mathbf{f}}^p \cdot (\mathbf{f}^p)^{-1} = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{\alpha} \mathbf{n}^{(\alpha)} \mathbf{b}^{(\alpha)} + \sum_{\beta} \dot{f}^{\beta} \gamma_{tw}^{\beta} \mathbf{n}^{(\beta)} \mathbf{b}^{(\beta)}. \quad (5)$$

Это кинематическое соотношение связывает неупругую составляющую тензора деформации скорости со скоростями сдвигов и образования двойников;  $\mathbf{n}^{(\alpha)}$  и  $\mathbf{b}^{(\alpha)}$  ( $\mathbf{n}^{(\beta)}$  и  $\mathbf{b}^{(\beta)}$ ) — нормаль и вектор Бюргера СС  $\alpha$  (СД  $\beta$ );  $\dot{\gamma}^{\alpha}$  — скорость сдвига по СС  $\alpha$ ;  $\dot{f}^{\beta} \gamma_{tw}^{\beta}$  — однородная скорость сдвига в кристалле в результате деформационного двойникования ( $\gamma_{tw}^{\beta}$  — величина постоянного сдвига, связанного с СД  $\beta$ ,  $f^{\beta}$  — объемная доля двойников (СД  $\beta$ ) в кристалле);  $N^s$  и  $N^{tw}$  — число активных СС и СД. В соответствии с (3) и (5) имеем:

$$\mathbf{I}^p = \mathbf{f}^* \cdot \left( \sum_{\alpha}^{N^s} \dot{\gamma}^{\alpha} \mathbf{n}^{(\alpha)} \mathbf{b}^{(\alpha)} + \sum_{\beta}^{N^{tw}} \dot{f}^{\beta} \gamma_{tw}^{\beta} \mathbf{n}^{(\beta)} \mathbf{b}^{(\beta)} \right) \cdot (\mathbf{f}^*)^{-1}.$$

В скорости и вихре пластической деформации можно выделить симметричную и антисимметричную части  $\mathbf{I}^p$ :

$$\mathbf{d}^p = \frac{1}{2} (\mathbf{I}^p + (\mathbf{I}^p)^T), \quad \mathbf{w}^p = \frac{1}{2} (\mathbf{I}^p - (\mathbf{I}^p)^T). \quad (6)$$

Критические напряжения для СС и СД соответственно представляются суммой термической и атермической составляющих [10]:  $\tau_c^{(\alpha)} = \tau_{c,t}^{(\alpha)} + \tau_{c,at}^{(\alpha)}$ ,  $s_c^{(\alpha)} = s_{c,t}^{(\alpha)} + s_{c,at}^{(\alpha)}$ , где  $\tau_c^{(\alpha)}$ ,  $\tau_{c,t}^{(\alpha)}$  ( $s_c^{(\beta)}$ ,  $s_{c,t}^{(\beta)}$ ) — напряжение сдвига и критическое напряжение сдвига для СС  $\alpha$  (СД  $\beta$ );  $\tau_{c,t}^{(\alpha)}$  ( $s_{c,t}^{(\alpha)}$ ) и  $\tau_{c,at}^{(\alpha)}$  ( $s_{c,at}^{(\alpha)}$ ) — термическая и атермическая составляющие. Полагается, что отношение  $\eta^{(\alpha)} = \tau_{c,t}^{(\alpha)} / \tau_{c,at}^{(\alpha)}$  ( $\eta^{(\beta)} = s_{c,t}^{(\alpha)} / s_{c,at}^{(\alpha)}$ ) не зависит от напряжения и удовлетворяет ограничениям  $0,5 \leq (\eta^{(\alpha)}, \eta^{(\beta)}) \leq 1$  [10].

Касательное напряжение для любой СС или СД определяется через тензор напряжений и соответствующий ориентационный тензор ( $\mathbf{M}^{(\alpha)}$  или  $\mathbf{M}^{(\beta)}$ ):

$$\tau^{(\alpha)} = \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{M}^{(\alpha)}, \quad \mathbf{M}^{(\alpha)} = (\mathbf{n}^{(\alpha)} \mathbf{b}^{(\alpha)} + \mathbf{b}^{(\alpha)} \mathbf{n}^{(\alpha)}) / 2; \quad (7)$$

$$s^{(\beta)} = \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{M}^{(\beta)}, \quad \mathbf{M}^{(\beta)} = (\mathbf{n}^{(\beta)} \mathbf{b}^{(\beta)} + \mathbf{b}^{(\beta)} \mathbf{n}^{(\beta)}) / 2. \quad (8)$$

Действующие касательные напряжения для СС и СД также представляются суммой термической и атермической составляющих. Часть касательного напряжения идет на преодоление атермических барьеров, причем для преодоления сопротивления скольжению атермическая составляющая касательного напряжения не может быть меньше атермической составляющей критического напряжения. Тогда термическая составляющая  $\tau_t^{(\alpha)}$  ( $s_t^{(\alpha)}$ ) выражается следующим образом [10]:  $\tau_t^{(\alpha)} = |\tau^{(\alpha)}| - \tau_{c,at}^{(\alpha)}$ ,  $s_t^{(\alpha)} = |s^{(\alpha)}| - s_{c,at}^{(\alpha)}$ , где  $\tau^{(\alpha)}$  ( $s^{(\alpha)}$ ) — текущее касательное напряжение.

Для нахождения скоростей сдвига и роста объемной доли двойников используются следующие соотношения [10]:

$$\dot{\gamma}^{\alpha} = \begin{cases} 0, & |\tau^{(\alpha)}| < \tau_c^{(\alpha)} / (\eta + 1), \\ \dot{\gamma}_0 \exp(-\Delta G^{\alpha}(\tau_t^{(\alpha)}, \tau_{c,t}^{(\alpha)}) / (kT)) \text{sign}(\tau^{(\alpha)}), & |\tau^{(\alpha)}| \geq \tau_c^{(\alpha)} / (\eta + 1); \end{cases} \quad (9)$$

$$\dot{f}^{\beta} = \begin{cases} 0, & s^{(\beta)} < s_c^{(\beta)} / (\eta + 1), \\ (\dot{\gamma}_0 / \gamma_{tw}^{\beta}) \exp(-\Delta G^{(\beta)}(s_t^{(\beta)}, s_{c,t}^{(\beta)}) / (kT)), & s^{(\beta)} \geq s_c^{(\beta)} / (\eta + 1), \end{cases} \quad (10)$$

где  $\dot{\gamma}_0$  — скорость сдвига при нулевой энтальпии активации (материальная константа);  $k$  — постоянная Больцмана;  $T$  — абсолютная температура (К);  $\gamma_{tw}^{\beta}$  — характеристика сдвига семейства двойников. В данном случае энтальпия активации  $\Delta G^{\alpha}$  равна

$$\Delta G^{\alpha} = \Delta F^{\alpha} \left[ 1 - \left( \tau_t^{(\alpha)} / \tau_{c,t}^{(\alpha)} \right)^p \right]^q, \quad \Delta G^{\beta} = \Delta F^{\beta} \left[ 1 - \left( s_t^{(\beta)} / s_{c,t}^{(\beta)} \right)^p \right]^q,$$

где  $\Delta F^{\alpha}$  — энергия активации при  $T = 0$ ,  $p$  и  $q$  — материальные параметры ( $0 < p < 1$ ,  $1 < q < 2$ ). Упрочнение СС описывается при этом следующим изотропным законом [3]:

$$\dot{\tau}_c^{(\alpha)} = h_s^{pri} \left( 1 - \tau_c^{(\alpha)} / \tau_s^{\alpha} \right) \sum_k^{N_s^{pri}} |\dot{\gamma}^k| + h_s^{bas} \left( 1 - \tau_c^{(\alpha)} / \tau_s^{\alpha} \right) \sum_l^{N_s^{bas}} |\dot{\gamma}^l| + h_s^{pyr} \left( 1 - \tau_c^{(\alpha)} / \tau_s^{\alpha} \right) \sum_m^{N_s^{pyr}} |\dot{\gamma}^m|, \quad (11)$$

где модули упрочнения и напряжения насыщения зависят от типа СС (базисная — *bas*, призматическая — *pri*, пирамидальная — *pyr*) и определяются следующим образом:

$$h_s^{pri} = h_{so}^{pri} \left( 1 + C \left( \sum_{\beta} f^{\beta} \right)^2 \right), \quad h_s^{bas} = h_{so}^{bas} \left( 1 + C \left( \sum_{\beta} f^{\beta} \right)^2 \right), \quad h_s^{pyr} = h_{so}^{pyr} \left( 1 + C \left( \sum_{\beta} f^{\beta} \right)^2 \right),$$

$$\tau_s^{\alpha} = \begin{cases} \tau_{so}^{pri} + s_{pr} \left( \sum_{\beta} f^{\beta} \right)^{0,5}, & \alpha \in pri \text{ СС}, \\ \tau_{so}^{bas} + s_{pr} \left( \sum_{\beta} f^{\beta} \right)^{0,5}, & \alpha \in bas \text{ СС}, \\ \tau_{so}^{pyr} + s_{pr} \left( \sum_{\beta} f^{\beta} \right)^{0,5}, & \alpha \in pyr \text{ СС}. \end{cases}$$

Здесь  $h_{so}^{\alpha}$  и  $\tau_{so}^{\alpha}$  — модули внутреннего упрочнения и напряжения насыщения в отсутствие двойникования;  $N_s^{\alpha}$  — число активных СС моды  $\alpha$ . Коэффициенты  $C$  и  $s_{pr}$  — параметры упрочнения, описывающие взаимодействие между СС и СД; двойники оказывают существенное влияние на процесс упрочнения, так как границы двойников служат препятствием для движения дислокаций. Коэффициенты  $C$  и  $s_{pr}$  находятся экспериментально. Сумма  $\sum_{\beta} f^{\beta}$  обозначает накопленную объемную долю двойников в зерне.

Упрочнение СД также опишем изотропным законом упрочнения, исключив при этом из рассмотрения влияние накопленных сдвигов, так как движение дислокаций не является препятствием для двойникования [11]:

$$\dot{s}_c^{(\alpha)} = h_s^{tw} \sum_k \dot{f}^k, \quad h_s^{tw} = h_{so}^{tw} \left( 1 - s_c^{(\alpha)} / s_s^{\alpha} \right)^{a_{tw}}, \quad (12)$$

где  $h_{so}^{tw}$  и  $s_s^{\alpha}$  — модуль упрочнения и напряжение насыщения для СД,  $a_{tw}$  — параметр материала.

Рассмотрим модель макроуровня. На макроуровне также полагается справедливой гипотеза об аддитивном разложении тензора деформации скорости  $\mathbf{D}$ :  $\mathbf{D} = \mathbf{D}^e + \mathbf{D}^p$ . В качестве определяющего соотношения макроуровня примем закон Гука в скоростной релаксационной форме:

$$\Sigma^r = \mathbf{C} : (\mathbf{D} - \mathbf{D}^p), \quad (13)$$

где  $\Sigma$  — тензор напряжений Коши (на макроуровне);  $\mathbf{C} = \langle \mathbf{c}^{(n)} \rangle$  — тензор упругих характеристик макроуровня; символ  $\langle \cdot \rangle$  означает оператор осреднения; индекс  $r$  указывает на коротационную производную:  $\Sigma^r = \dot{\Sigma} - \Omega \cdot \Sigma + \Sigma \cdot \Omega$ ;  $\mathbf{D}^p = \langle \mathbf{d}^{p(n)} \rangle$  — неупругая составляющая тензора деформации скорости. Следует отметить, что тензор напряжений Коши макроуровня может быть установлен путем осреднения тензоров напряжений мезоуровня:  $\Sigma = \langle \sigma^{(n)} \rangle$ . Именно так поступают авторы многих работ, однако при этом теряет смысл определяющее соотношение (13), необходимое для постановки и решения краевой задачи на макроуровне. Для согласования указанных способов установления  $\Sigma$  авторами предлагаемой работы получено, что в коротационной производной тензора напряжений Коши макроуровня тензор спина должен быть следующим:  $\Omega = \langle \omega^{(n)} \rangle$ .

При интенсивных пластических деформациях происходит изменение температуры материала. Найдем эту температуру, пренебрегая теплообменом с окружающей средой. Запишем первое начало термодинамики:  $\dot{U} = \delta Q / \delta t + \delta A / \delta t$ , где  $\dot{U}$  — производная внутренней энергии тела,  $\delta Q / \delta t$  — скорость подведения к телу теплоты,  $\delta A / \delta t$  — скорость совершения работы над телом (мощность пластических деформаций). С учетом сделанных выше предположений имеем:

$$\dot{U} = \alpha W^p; \quad (14)$$

здесь  $W^p$  — мощность пластических деформаций;  $\alpha$  — доля работы, превращаемая в тепло (коэффициент

выхода тепла), в общем случае  $\alpha \in [0, 1]$ . Мощность пластической деформации представительного объема макроуровня определяется соотношением:

$$W^p = \int_V \Sigma : \mathbf{D}^p dV = V \Sigma : \mathbf{D}^p, \quad (15)$$

при этом  $\mathbf{D}^p$  находится путем осреднения пластических составляющих тензора деформации скорости кристаллитов, входящих в поликристаллический агрегат. Внутренняя энергия, если пренебречь изменением теплоемкости при изменении температуры, преобразуется к виду:

$$\dot{U} = C_m m \dot{T}, \quad (16)$$

где  $m$  — масса вещества,  $C_m$  — удельная теплоемкость. Тогда, учитывая (14)–(16), получим:

$$\dot{T} = \alpha \frac{\Sigma : \mathbf{D}^p}{C_m \rho} \quad (17)$$

( $\rho$  — плотность вещества).

Рассмотренная выше система соотношений полностью соответствует структуре конститутивной модели с внутренними переменными, предложенной в [1]: выражение (13) представляет собой собственно определяющее соотношение макроуровня, явными внутренними переменными в котором являются  $\mathbf{C}$ ,  $\mathbf{D}^p$ ,  $\mathbf{\Omega}$ , неявными —  $\mathbf{d}^{p(n)}$ ,  $\mathbf{\omega}^{(n)}$  и ориентационные тензоры кристаллитов  $\mathbf{O}^{(n)}$ . В качестве эволюционных выступают уравнения модели мезоуровня; наконец, замыкающие соотношения представляют собой операции осреднения для тензора упругих характеристик, неупругой составляющей тензора деформации скорости и тензора спина макроуровня.

При численной реализации модели (в том числе — операций осреднения) возникает необходимость в работе с компонентами тензоров, для чего они должны быть представлены в одном базисе. При этом в постановке задачи часть величин изначально определяется в базисе ЛСК (например, скорости перемещений, тензор деформации скорости), другие же удобнее «привязывать» к базису КСК (например, компоненты тензора упругих характеристик  $\mathbf{e}^{(n)}$ ). Пусть ориентация каждого  $n$ -го кристаллита определяется тензором ориентации  $\mathbf{O}^{(n)}$ , связывающим базисы в ЛСК и КСК по закону (1). В соответствии с (2) компоненты тензора поворота в различных базисах совпадают. С помощью компонент тензора поворота векторов и тензоров можно перевести в ЛСК, если известны их компоненты в КСК, и наоборот. Компоненты произвольного тензора, например, тензора деформации скорости, при переходе от ЛСК к КСК можно выразить с использованием тензора ориентации:  $(d^{(n)})_{ij}^{КСК} = O_{mi}^{(n)} (d^{(n)})_{ml}^{ЛСК} O_{lj}^{(n)}$ .

Теперь, согласно гипотезе Фойгта, можно найти компоненты тензора деформации скорости для каждого зерна в КСК. Далее, с помощью модели мезоуровня устанавливаются компоненты тензора напряжений Коши в КСК. Его компоненты также можно выразить в ЛСК:  $(\sigma^{(n)})_{ij}^{ЛСК} = O_{im}^{(n)} (\sigma^{(n)})_{ml}^{КСК} O_{jl}^{(n)}$ .

Напомним, что в рамках предлагаемой работы краевая задача макроуровня не рассматривается; на макроуровне исследуется НДС однородно деформируемого макрообразца, поведение которого полностью воспроизводится деформированием представительного макрообъема.

#### 4. Алгоритм реализации двухуровневой модели

В рамках данного исследования используется двухуровневая модель упруговязкопластического деформирования представительного объема ГПУ-поликристалла. На макроуровне задается программа кинематического нагружения (то есть в каждый момент времени, включая начальный, считается известным тензор деформации скорости); при описании деформированного состояния мезоуровня используется гипотеза Фойгта. Неупругая составляющая тензора деформации скорости устанавливается из модели мезоуровня с помощью упруговязкопластических соотношений и операции осреднения по объему.

На макроуровне в начальный момент времени принимается естественное состояние (отсутствие начальных напряжений), полагается известной функция распределения ориентации зерен. На мезоуровне начальные напряжения также полагаются нулевыми, известны тензор упругих свойств монокристалла, начальные критические напряжения для СС и СД, коэффициенты упрочнения и насыщения; по известному

закону распределения ориентаций находятся начальные ориентации каждого из кристаллитов — элементов мезоуровня.

В силу физической и геометрической нелинейности решаемых задач для реализации модели требуется применение пошаговых процедур. Для этого весь интервал нагружения разбивается на ряд малых временных шагов, величина которых определяется на основе численных экспериментов. На каждом шаге по времени алгоритм реализуется в два этапа: на первом этапе по параметрам конца предыдущего шага (начала текущего шага) решаются задачи мезо- и макроуровня в скоростях, на втором этапе интегрируются скоростные характеристики и вычисляются параметры на конец данного шага. Следует отметить «проблему первого шага», на котором напряжения мезо- и макроуровня начала шага тривиальны, в силу чего неупругие составляющие тензора деформации скорости мезо- и микроуровня будут нулевыми. В связи с этим на первом шаге задача решается как упругая; для минимизации ошибки ее решения величина первого шага выбирается на один или два порядка меньше величины остальных шагов.

На произвольном  $m$ -м шаге по времени для представительного объема макроуровня известными для момента  $t_m$  (конец  $(m-1)$  — начало  $m$ -го шага) являются тензор напряжений Коши, перемещения (по которым можно найти тензор деформаций), тензор упругих характеристик, тензор спина; задается тензор деформации скорости  $\mathbf{D}_{(m)}$ .

Затем осуществляется переход к элементам мезоуровня (зернам), реализуется цикл по номерам зерен. Для каждого  $n$ -го зерна известны: градиент места, его упругая и неупругая составляющие, задающий ориентацию КСК на начало  $m$ -го шага тензор  $\mathbf{O}_{(m)}^{(n)}$ , текущие критические напряжения, накопленные сдвиги, объемная доля двойников по соответствующим кристаллографическим системам, тензор напряжений. В соответствии с гипотезой Фойгта известны значения тензора деформации скорости в данный момент времени:  $\mathbf{d}_{(m)}^{(n)} = \mathbf{D}_{(m)} = \langle \mathbf{d}_{(m)} \rangle = \mathbf{d}_{(m)}$ .

Рассмотрим алгоритм решения задачи на мезоуровне для  $n$ -го зерна в текущий момент времени  $t_m$  (индексы, обозначающие момент времени, в дальнейшем изложении опускаются):

1. Решение задачи в скоростях:

- а) определяются компоненты тензора деформации скорости в КСК:  $(d^{(n)})_{ij}^{KCK} = O_{mi}^{(n)} (d^{(n)})_{ml}^{JKK} O_{lj}^{(n)}$ ;
- б) по известным напряжениям мезоуровня и соотношениям (7)–(10) в каждой СС и СД вычисляются касательные напряжения, скорости сдвигов, скорости роста объемной доли двойников и пластическая составляющая градиента скорости перемещений в промежуточной конфигурации по формуле (5);
- в) находится градиент скорости пластической деформации в текущей конфигурации, а также скорость пластической деформации и спин решетки с помощью соотношений (4), (6);
- г) устанавливаются компоненты тензора скорости напряжений по закону Гука:  $\dot{\sigma}_{ij}^{KCK} = c_{ijkl}^{KCK} (d_{lk}^{KCK} - (d_{lk}^p)^{KCK})$ .

2. Нахождение параметров мезоуровня на конец текущего шага по времени (этап интегрирования):

- а) определяются компоненты тензора напряжений;
- б) согласно соотношению для спина  $\boldsymbol{\omega}^{(n)} = \dot{\mathbf{O}}^{(n)} \cdot \mathbf{O}^{(n)T}$ , где тензор спина задан соотношением (4), находятся компоненты тензора поворота;
- в) вычисляются компоненты тензоров пластической и упругой составляющей градиента места  $\dot{\mathbf{f}}^p = \mathbf{I}^p \cdot \mathbf{f}^p, \mathbf{f}^* = \mathbf{f} \cdot (\mathbf{f}^p)^{-1}$ .

После завершения цикла по зернам устанавливаются параметры макроуровня:  $\mathbf{C} = \langle \mathbf{c}^{(n)} \rangle$ ,  $\mathbf{D}^p = \langle \mathbf{d}^p \rangle$ ,  $\boldsymbol{\Omega} = \langle \boldsymbol{\omega}^{(n)} \rangle$ , вычисляются компоненты тензора скорости напряжений по закону Гука (13). Последующее интегрирование дает компоненты тензора напряжений макроуровня; осуществляется переход на следующий шаг по времени.

Для используемого метода интегрирования системы дифференциальных уравнений (метода Адамса–Моултона) была исследована сходимость при различных скоростях нагружения и, в соответствии с заданной для компонент тензора напряжений погрешностью (0,1%), выбирался шаг интегрирования.

## 5. Постановка, описание и анализ результатов решения задачи одноосного растяжения при различных температурах

Рассмотрим постановку задачи в случае одноосного растяжения (сжатия) представительного объема макроуровня ГПУ-металла (или макрообразца). Для определенности примем, что растяжение (сжатие) происходит вдоль оси  $Ox^3$  фиксированной лабораторной системы координат. Следует отметить, что в применяемой модели, основанной на гипотезе Фойгта, реализуется жесткое нагружение: для любого момента времени предписанным является тензор деформации скорости. Однако условия реализации



эксперимента не позволяют напрямую задать все компоненты данного тензора, то есть одноосное нагружение в исходной постановке нельзя вести чисто кинематически, поскольку на макроуровне имеют место смешанные граничные условия. В связи с этим реализация одноосного растяжения (сжатия) в рамках модели осуществляется следующим образом: предписывается только одна компонента тензора деформации скорости на макроуровне в ЛСК —  $D_{33}^{ЛСК}(t)$ , а остальные компоненты определяются в результате решения задачи, исходя из необходимости обеспечения соответствующего одноосного напряженного состояния.

Математическая постановка задачи одноосного растяжения–сжатия представительного объема макроуровня включает следующую систему уравнений:

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{\Sigma} = \mathbf{C} : (\mathbf{D} - \mathbf{D}^p) + \Omega \cdot \Sigma - \Sigma \cdot \Omega, \\ \left[ \dot{\Sigma} \right]_{ij}^{ЛСК} = 0, \quad (ij) \neq (33), \\ \left[ \mathbf{D} \right]_{33}^{ЛСК} = \left[ \mathbf{D} \right]_{33}^{ЛСК(\text{предписанное})}, \\ \mathbf{C} = \langle \mathbf{c}^{(n)} \rangle, \quad \mathbf{D}^p = \langle \mathbf{d}^{p(n)} \rangle, \quad \Omega = \langle \omega^{(n)} \rangle, \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4-6 \end{array} \quad (18)$$

где уравнения (18)<sub>1</sub> — закон Гука в скоростной релаксационной форме с учетом геометрической нелинейности; (18)<sub>2</sub> — условие удовлетворения одноосному напряженному состоянию; (18)<sub>3</sub> — задание кинематического нагружения; (18)<sub>4-6</sub> — уравнения для определения параметров макроуровня (тензора упругих свойств макроуровня, скорости неупругой деформации и спина решетки).

Тогда постановка задачи мезоуровня (для упрощения записи номера зерен опускаются) принимает вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{\sigma} = \mathbf{c} : (\mathbf{d} - \mathbf{d}^p) + \omega \cdot \sigma - \sigma \cdot \omega, \\ \mathbf{d}^p = \left( \mathbf{I}^p + (\mathbf{I}^p)^T \right) / 2, \quad \mathbf{I}^p = \mathbf{f}^* \cdot \left( \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{\alpha} \mathbf{n}^{(\alpha)} \mathbf{b}^{(\alpha)} + \sum_{\beta} \dot{f}^{\beta} \gamma_{nw}^{\beta} \mathbf{n}^{(\beta)} \mathbf{b}^{(\beta)} \right) \cdot (\mathbf{f}^*)^{-1}, \\ \dot{\gamma}^{\alpha} = \dot{\gamma}^{\alpha}(\tau^{\alpha}, \tau_c^{\alpha}, T), \quad \dot{f}^{\beta} = \dot{f}^{\beta}(\tau^{\beta}, s_{pr}^{\beta}, T), \\ \tau^{(\alpha)} = \sigma : \mathbf{M}^{(\alpha)}, \quad s^{(\beta)} = \sigma : \mathbf{M}^{(\beta)} \\ \dot{\tau}_c^{\alpha} = h_s^{\alpha} \left( 1 - \frac{\tau_c^{\alpha}}{\tau_s^{\alpha}} \right) \sum_{i=1}^{K_{\alpha}} \dot{\gamma}^i \quad (k=1, \dots, K_{\alpha}), \\ h_s^{\alpha} = h_{so}^{\alpha} \left( 1 + C \left( \sum_{\beta} f^{\beta} \right)^2 \right), \quad \tau_s^{\alpha} = \tau_{so}^{\alpha} + s_{pr} \left( \sum_{\beta} f^{\beta} \right)^{0,5}, \\ d_{ij}^{ЛСК} = D_{ij}^{ЛСК} \\ \omega = \mathbf{w} - \mathbf{w}^p, \quad \mathbf{w}^p = \left( \mathbf{I}^p - (\mathbf{I}^p)^T \right) / 2, \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \\ 6 \\ 7 \\ 8 \end{array} \quad (19)$$

где уравнения (19)<sub>1</sub> — закон Гука в скоростной релаксационной форме с учетом геометрической нелинейности; (19)<sub>2</sub> — формулы для вычисления кинематических характеристик неупругого деформирования; (19)<sub>3</sub> — упруговязкопластические соотношения для скоростей сдвигов и роста объемной доли двойников; (19)<sub>4</sub> — соотношения для касательных напряжений на СС и СД соответственно; (19)<sub>5</sub> — закон упрочнения; (19)<sub>6</sub> — соотношения для коэффициентов упрочнения и насыщения; (19)<sub>7</sub> — задание кинематического нагружения; (19)<sub>8</sub> — соотношения для определения ротации решетки.

Явными внутренними (входящими в связь отклика  $\sigma$  и воздействия  $\mathbf{d} = \mathbf{D}$ ) переменными мезоуровня являются скорости неупругих деформаций и спин решетки. Скорости сдвигов и критические напряжения сдвига для СС и СД можно отнести к неявным внутренним переменным мезоуровня (не входят напрямую в связь отклика и воздействий, но используются для определения явных внутренних переменных).

Для сопоставления результатов моделирования с данными численных экспериментов из работы [12] проведена идентификация коэффициентов упрочнения и насыщения для материала  $\alpha$ -Тi высокой степени чистоты (доля титана 99,9998%). Начальные критические напряжения, а также параметры влияния двойников на упрочнение на СС, будем считать известными [3]:  $\tau_o^{pri} = 30$  МПа,  $\tau_o^{pyr} = 120$  МПа,  $\tau_o^{bas} = 150$  МПа,  $\tau_o^{nw} = 125$  МПа;  $s_{pr} = 100$  МПа,  $C = 25$ .

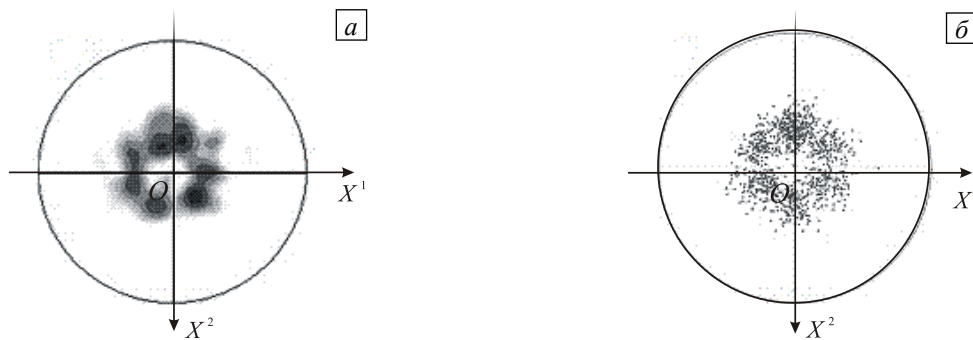
Также с использованием результатов экспериментов [12] осуществлена идентификация предлагаемой модели, для чего поставлена и решена следующая задача оптимизации: найти  $x = \{ \tau_{so}^{bas}, h_{so}^{bas}, \tau_{so}^{pri}, h_{so}^{pri}, \tau_{so}^{pyr}, h_{so}^{pyr}, s_s^{nw}, h_s^{nw} \}$ , доставляющий минимум целевой функции

$$\sum_i (\Sigma^{E_i}(\mathbf{x}) - \Sigma_*^{E_i})^2 \rightarrow \min \quad (20)$$

при ограничениях типа равенств (18), (19), где  $\Sigma_*^E$  — значения напряжений, получаемые по аппроксимированной экспериментальной диаграмме одноосного нагружения при интенсивности деформации  $E$ ;  $\Sigma^E$  — интенсивность напряжений, рассчитанная с помощью модели; индекс  $i$  обозначает номер точки на аппроксимированной экспериментальной диаграмме нагружения.

В решении задачи оптимизации выделены два этапа. На первом этапе численно (методом Хука–Дживса) решена задача оптимизации (20) при ограничениях типа равенств (18), (19) до достижения начального критического напряжения двойникования  $\tau_o^{nw}$  хотя бы одной из СД. При этом в задаче (20) параметрами управления являются только параметры, характеризующие скольжение  $x = \{ \tau_{so}^{bas}, h_{so}^{bas}, \tau_{so}^{pri}, h_{so}^{pri}, \tau_{so}^{pyr}, h_{so}^{pyr} \}$ . После достижения  $\tau_o^{nw}$  начинается второй этап, на котором параметрами управления будут  $x = \{ s_s^{nw}, h_s^{nw} \}$ . Таким образом, сначала идентифицируются параметры, определяющие скольжение, затем — параметры двойникования и взаимодействия двух мод неупругого деформирования (скольжения и двойникования). Данный прием позволяет сократить время вычислений и получить удовлетворительные результаты на стадии верификации модели.

Идентификация проводилась для поликристаллического материала, обладающего начальной текстурой (характерные углы наклона оси  $Ox^3$  КСК относительно оси  $Ox^3$  ЛСК —  $20^\circ - 35^\circ$ , Рис. 4), который подвергался сжатию вдоль оси  $Ox^1$  ЛСК; для верификации использовались результаты экспериментов на сжатие вдоль оси  $Ox^3$  ЛСК и простой сдвиг в плоскости  $Ox^1X^2$ . Получены следующие значения параметров:  $\tau_{so}^{pri} = 125$  МПа,  $\tau_{so}^{bas} = 300$  МПа,  $\tau_{so}^{pyr} = 165$  МПа,  $s_s^{nw} = 800$  МПа;  $h_{so}^{pri} = 120$  МПа,  $h_{so}^{bas} = 30$  МПа,  $h_{so}^{pyr} = 250$  МПа,  $h_s^{nw} = 7500$  МПа.

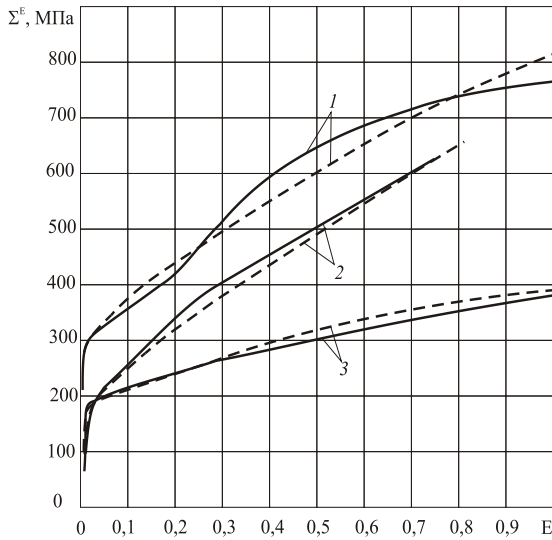


**Рис. 4.** Полусная фигура вдоль  $Ox^3$  для направления [0001]: экспериментальные данные (а); заданная при идентификации текстура (б)

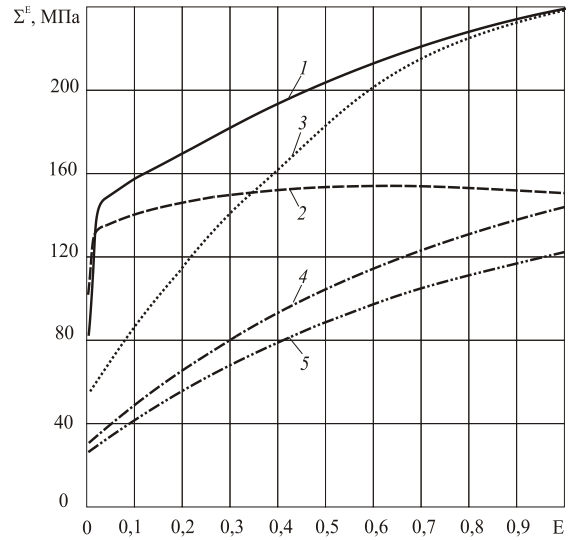
Полученные результаты находятся в удовлетворительном соответствии с экспериментальными данными (Рис. 5), причем в численных экспериментах на простой сдвиг и одноосное нагружение вдоль оси  $Ox^1$  они лучше соответствуют экспериментальным данным, чем результаты моделирования в работах [3, 13], в эксперименте на сжатие вдоль оси  $Ox^3$  — несколько хуже.

С использованием полученных параметров исследовался процесс одноосного растяжения образца со скоростью деформирования  $D_{33} = 10^{-5} c^{-1}$  вдоль оси  $Ox^3$  ЛСК. Для достижения требуемой точности (погрешность для компонент тензора напряжений не должна была превышать 0,1%) при данной скорости напряжений шаг интегрирования  $\Delta t$  не превосходил 0,01 с.

ГПУ-кристаллы обладают существенной анизотропией свойств, которая зависит от положения оси  $ox^3$  КСК по отношению к направлениям нагружения. Для выяснения особенностей пластического деформирования ГПУ-кристаллов рассмотрим одноосное растяжение монокристалла при изменяющейся



**Рис. 5.** Сравнение полученных (сплошные линии) и экспериментальных (пунктирные линии) данных [13] при скорости деформирования  $0,01 \text{ с}^{-1}$  и начальной температуре 298 К: сжатие вдоль оси  $OX^3$  (кривые 1); сжатие вдоль оси  $OX^1$  (2); простой сдвиг в плоскости  $OX^1X^2$  (3)



**Рис. 6.** Зависимость напряженно-деформированного состояния от угла ориентации зерен: 0 (кривая 1);  $\pi/8$  (2);  $\pi/4$  (3);  $3\pi/8$  (4);  $\pi/2$  (5)

ориентации кристалла относительно осей ЛСК (при растяжении по фиксированному направлению  $OX^3$ ). Оси  $OX^2$  и  $ox^2$  совмещены, ориентация кристалла в этом случае полностью определяется углом между  $OX^3$  и  $ox^3$  (или  $OX^1$  и  $ox^1$ ).

Полученные зависимости интенсивности напряжений от интенсивности деформаций для различных ориентаций кристаллитов (Рис. 6) позволяют установить момент начала пластического деформирования, сравнить скорости упрочнения для различных углов между осью  $ox^3$  и направлением растяжения. Так, на графиках для зерен с углами ориентации 0 и  $\pi/8$  после упругого деформирования до напряжений 80 и 100 МПа, соответственно, начинается упругопластический участок: активизируются дислокации призматических СС; вдоль остальных направлений происходит упругое деформирование. Далее в деформирование вступают другие СС. В зерне с ориентацией  $\pi/8$  ротация приводит к постепенному включению в процесс призматических СС, вследствие чего напряжения в зерне растут незначительно. В зерне с ориентацией  $\pi/4$  скольжение осуществляется как по призматическим, так и по пирамидальным СС, при этом постепенная активизация СД сопровождается ростом напряжений.

Из таблицы 2 следует, что накопленный сдвиг и объемная доля двойников, а также температура, существенно зависят от угла наклона оси  $ox^3$  КСК относительно оси  $OX^3$  ЛСК. Максимальный сдвиг и максимальная объемная доля двойников достигаются при угле  $\pi/16$ , а максимальная температура — при угле 0 (хотя при  $\pi/16$  пластические деформации больше, но напряжения достигают больших значений при угле 0, вследствие чего при этом и температура выше). Наименьшие напряжения, необходимые для пластического деформирования, соответствуют ориентациям, при которых деформирование осуществляется путем скольжения по призматическим СС.

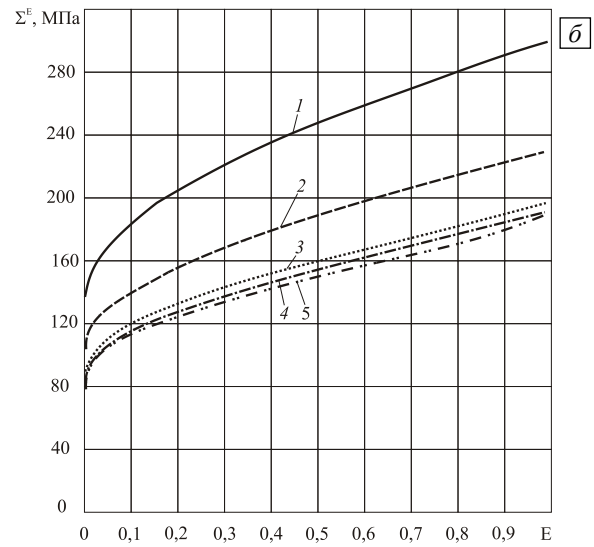
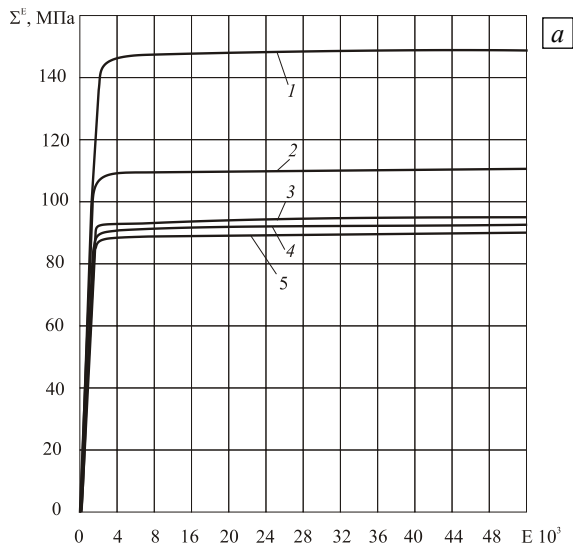
Таблица 2. Зависимость конечной температуры от угла наклона оси  $ox^3$  КСК относительно оси  $OX^3$  ЛСК

Угол	Температура, К	Накопленный сдвиг	Объемная доля двойников, %
0	355	1,29	23
$\pi/16$	346	1,88	27
$\pi/8$	338	1,71	18
$3\pi/16$	330	1,48	10
$\pi/4$	328	1,44	3
$5\pi/16$	323	1,33	0
$3\pi/8$	323	1,33	1
$7\pi/16$	321	1,33	0
$\pi/2$	321	1,33	0

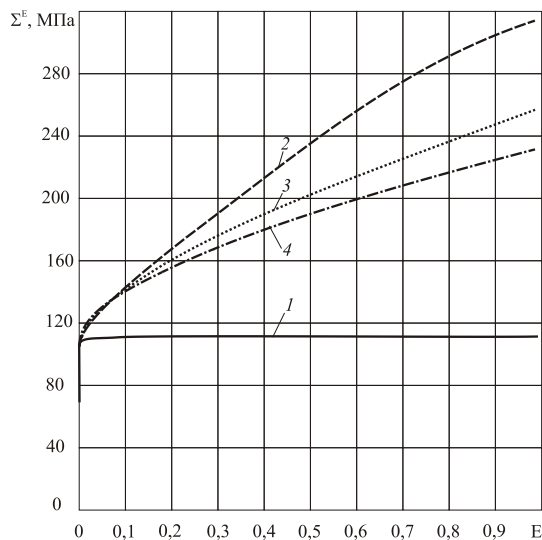
Во всех последующих численных экспериментах рассматривается одноосное растяжение поликристалла (из 1000 зерен) вдоль оси  $OX^3$  с равномерным распределением начальных углов ориентации.

Для качественной проверки упругопластической модели на макроуровне исследован процесс одноосного растяжения поликристалла, содержащего 1000 зерен, без учета (Случай 1) и с учетом (Случай 2) упрочнения, ротации решетки и изменения температуры. Получены зависимости напряжений от интенсивности накопленных деформаций, иллюстрирующие влияние начальной температуры (Рис. 7) и разного сочетании упрочнения, ротации решетки и действия тепловых источников (Рис. 8).

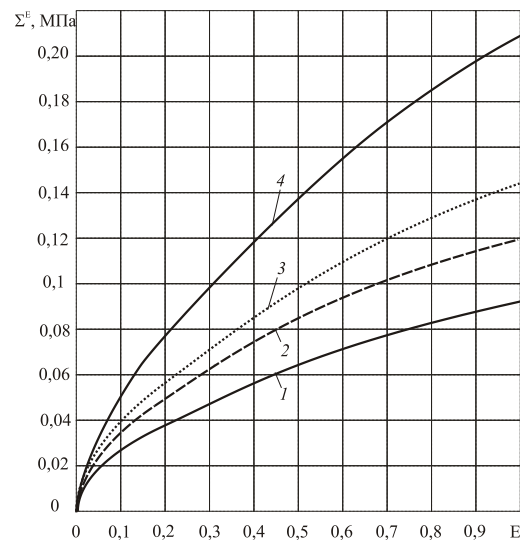
Проанализируем роль начальной температуры. В первом случае (Рис. 7, а) деформирование описывается диаграммой идеальной пластичности, чего и следовало ожидать, и происходит при меньших напряжениях, что соответствует физической сути исследуемого процесса. Во втором случае при значениях интенсивности накопленных деформаций до 0,002 наблюдается чисто упругий участок; далее происходит постепенное подключение СС и СД, начинается пластический участок с упрочнением; при интенсивностях деформации, больших 0,003, скорость роста напряжений снижается вследствие ротации решеток.



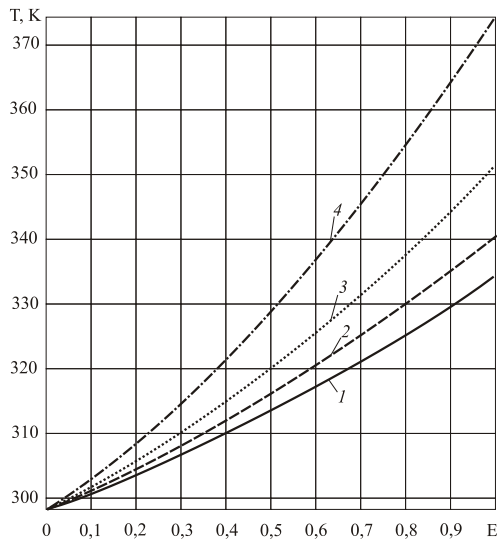
**Рис. 7.** Зависимости интенсивности напряжений от интенсивности накопленных деформаций без учета (а) и с учетом (б) упрочнения, ротации решетки и изменения температуры при различных значениях начальной температуры, К: 77 (кривая 1); 298 (2); 598 (3); 798 (4); 998 (5)



**Рис. 8.** Зависимости интенсивности напряжений от интенсивности накопленных деформаций при начальной температуре 298 К без учета упрочнения, ротации решетки и изменения температуры (кривая 1); с учетом упрочнения, но без учета ротации решетки и изменения температуры (2); с учетом упрочнения, ротации решетки, но без учета изменения температуры (3); с учетом упрочнения, ротации решетки и изменения температуры (4)



**Рис. 9.** Зависимость средней накопленной доли двойников от интенсивности накопленных деформаций при различных значениях скорости деформации,  $s^{-1}$ : 0,00001 (кривая 1); 0,0001 (2); 0,001 (3); 0,01 (4)



**Рис. 10.** Зависимость температуры от интенсивности накопленных деформаций при различных значениях скорости деформации,  $\text{с}^{-1}$ : 0,00001 (кривая 1); 0,0001 (2); 0,001 (3); 0,01 (4)

скорость сдвига по СС и скорость роста объемной доли двойников. Рассмотрим, в частности, зависимость средней объемной доли двойников, накопленного сдвига по СС и температуры от интенсивности деформаций при различных скоростях деформирования. Из результатов расчета (Рис. 9) следует, что средняя объемная доля двойников при достижении накопленной деформации 1,0 составляет от 9% (для скорости деформации  $10^{-5} \text{ с}^{-1}$ ) до 21% ( $10^{-2} \text{ с}^{-1}$ ). При этом максимальная объемная доля двойников в некоторых зернах достигает 40%, что согласуется с данными работы [13]. Кроме этого, прослеживается снижение скорости роста объемной доли двойников при росте деформации, что связано с упрочнением по СД. Зависимость температуры от накопленной деформации в предположении адиабатического процесса приведена на рисунке 10. Результаты расчетов показывают также, что накопленный зернами сдвиг не зависит ни от скорости деформирования, ни от начальной температуры; для накопленной деформации 1,0 в среднем он достигает значения 1,69.

## 6. Выводы

В работе предложена и реализована модификация упруговязкопластической модели [3] поликристаллического ГПУ-кристалла, учитывающая такие механизмы пластического деформирования, как скольжение дислокаций и двойникование, а также неизотропное упрочнение металла. В предложенной модификации, в отличие от исходной модели [3], учтены влияние температуры, тепловыделение, ротация решетки (введением модели стесненного поворота Тейлора); определены параметры для закона Гука на макроуровне; описано упрочнение для двойников. Кроме того, осуществлена корректная постановка задачи одноосного нагружения.

Реализованы численные эксперименты для исследования одноосного растяжения моно- и поликристаллического образца на примере титана с ГПУ-решеткой и выполнены расчеты с учетом влияния температуры, упрочнения и ротации решеток кристаллитов. Проведена идентификация и верификация модели. Полученные результаты находятся в удовлетворительном соответствии с экспериментальными данными.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (проект № 13.G25.31.0093 от 22.10.2010 г. в составе мероприятия по реализации постановления Правительства РФ № 218) и РФФИ (проекты № 10-08-00156-а, 10-08-96010-р\_Урал\_а).

## Литература

1. Трусов П.В., Швейкин А.И. Теория определяющих соотношений: учеб. пособие. Ч. II. Теория пластичности. – Пермь: Изд-во ПГТУ, 2008. – 243 с.
2. Taylor G.I. Plastic strain in metals // J. Inst. Metals. – 1938. – V. 62. – P. 307-324.
3. Wu X., Kalidindi S.R. Prediction of crystallographic texture evolution and anisotropic stress-strain response during large plastic deformation in high-purity  $\alpha$ -titanium // Вопросы материаловедения. – 2007. – № 4 (52). – P. 97-103.
4. Рыбин В.В. Большие пластические деформации и разрушение металлов. – М.: Металлургия, 1986. – 224 с.
5. Хоникомб Р. Пластическая деформация металлов. – М.: Мир, 1972. – 408 с.

Влияние на процесс деформирования упрочнения, ротации решетки и изменения температуры при их разном сочетании и фиксированном значении начальной температуры показано на рисунке 8. Очевидно, что ротация оказывает существенное влияние на НДС поликристалла, поскольку приводит к снижению напряжений. Это происходит потому, что вследствие переориентации зерен для осуществления тех же деформаций требуются меньшие напряжения. При сравнении кривых 3 и 4 можно отметить, что рост температуры процесса, обусловленный тепловыми источниками от пластической деформации, несколько уменьшает значение интенсивности напряжений.

Интерес представляет действие на НДС поликристалла скорости деформирования. Входящие в модель соотношения (9)–(10) позволяют качественно оценить эту зависимость. Так, повышение скорости деформирования, в соответствии с (17), приводит к росту температуры, которая, в свою очередь, оказывает влияние на

6. Поздеев А.А., Трусов П.В., Няшин Ю.И. Большие упругопластические деформации: теория, алгоритмы, приложения. – М.: Наука, 1986. – 232 с.
7. Трусделл К. Первоначальный курс рациональной механики сплошных сред. – М.: Мир, 1975. – 592 с.
8. Ашихмин В.Н., Трусов П.В., Швейкин А.И. Двухуровневая модель стационарных процессов упругопластического деформирования Часть 1. Алгоритм // Вычисл. мех. сплош. сред. – 2008. – Т. 1, № 3. – С. 15-24.
9. Kalidindi S.R. Incorporation of deformation twinning in crystal plasticity models // J. Mech. Phys. Solids. – 1998. – V. 46, N. 2. – P. 267-290. DOI
10. Ganapathysubramanian S., Zabaras N. Modeling the thermoelastic-viscoplastic response of polycrystals using continuum representation over orientation space// Int. J. Plast.— 2005. – V. 21, N. 1. – P. 119-144. DOI
11. Staroselsky A., Anand L. Inelastic deformation of polycrystalline face cubic materials by slip and twinning // J. Mech. Phys. Solids. – 1998. – V. 46, N. 4. – P. 671-696. DOI
12. Salem A.A., Kalidindi S.R., Doherty R.D. Strain hardening of titanium: role of deformation twinning /// Acta Mater. – 2003. – V. 51, N. 14. – P. 4225-4237. DOI
13. Wu X., Kalidindi S.R., Necker C., Salem A.A. Modeling anisotropic stress-strain response and crystallographic texture evolution in  $\alpha$ -titanium during large plastic deformation using Taylor-type models: influence of initial texture and purity // Metallurgical and materials transactions A. – 2008. – V. 39, N. 12. – P. 3046-3054. DOI

Поступила в редакцию 23.03.11; опубликована в электронном виде 11.04.12

---

Сведения об авторах

Бразгина Ольга Владимировна, студ., Пермский национальный исследовательский политехнический университет (ПНИПУ), 614990, Пермь, Комсомольский проспект, д. 29; E-mail: olyck@yandex.ru

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