

DOI: 10.7242/1999-6691/2014.7.2.19  
УДК 539.3

## ДВУХУРОВНЕВАЯ МОДЕЛЬ ДЛЯ ОПИСАНИЯ НЕИЗОТЕРМИЧЕСКОГО ДЕФОРМИРОВАНИЯ ДВУХФАЗНЫХ ПОЛИКРИСТАЛЛОВ

П.В. Трусов, Н.С. Кондратьев

*Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь, Российская Федерация*

В последние десятилетия во многих областях промышленности широкое применение нашли двухфазные аустенитно-ферритные (дуплекс) стали, обладающие уникальными по сравнению с отдельными фазами поликристалла свойствами. Существенной особенностью высокотемпературного деформирования указанного класса материалов является одновременное протекание процессов упрочнения и разупрочнения, что и обеспечивает высокую пластичность материалов. Вследствие того, что для ферритной фазы характерна высокая энергия дефекта упаковки (ЭДУ), в ней происходит динамический возврат, а в аустенитной фазе (с низкой ЭДУ) релаксация упругих напряжений осуществляется путем рекристаллизации. В работе используется актуальный в настоящее время подход к описанию пластического деформирования, согласно которому в явном виде рассматриваются физические механизмы неупругого деформирования на масштабных уровнях, более низких, чем макроскопический. Для обсуждаемого класса материалов неупругое деформирование реализуется главным образом скольжением краевых дислокаций по кристаллографическим плоскостям и направлениям. На основе физического анализа в постановку задачи введено влияние температуры на подвижность мобильных дислокаций. Принимаются во внимание основные физические механизмы упрочнения кристалла за счет взаимодействия мобильных дислокаций с дислокациями леса, барьеров типа Ломера–Коттрелла и границ зерен. Предложен способ учета явления разупрочнения фаз, связанный с возвратом и рекристаллизацией. Обсуждается модификация физической двухуровневой модели, ориентированной на описание высокотемпературного деформирования дуплекс сталей; дается ее полная математическая постановка. Приведен алгоритм численной реализации модели. Показано, что полученные на ее основе результаты качественно согласуются с данными экспериментов.

*Ключевые слова:* физические теории пластичности, дуплекс стали, разупрочнение систем скольжения, динамический возврат, рекристаллизация

## A TWO-LEVEL MODEL FOR DESCRIBING THE NONISOTHERMAL DEFORMATION OF TWO-PHASE POLYCRYSTALS

P.V. Trusov and N.S. Kondratiev

*Perm National Research Polytechnic University, Perm, Russian Federation*

Over the last few decades, two-phase austenitic-ferrite (duplex) steels have found wide application in many industries. Duplex steels have unique properties compared to the individual phases of the polycrystalline material. The essential feature of high-temperature deformation of this class of materials is softening processes, which provide the high ductility of polycrystals. Because a ferrite phase has high stacking fault energy (SFE), there occurs dynamic recovery, and in an austenitic phase with low SFE the relaxation of elastic stresses is attained during recrystallization. The paper uses an urgent approach to the description of plastic deformation which enables us to consider in explicit way the physical mechanisms of inelastic deformation at the scale levels lower than the macroscopic level. The main deformation mechanism for this class of materials is the slipping of edge dislocations over the crystallographic planes and directions. The effect of temperature on the mobility of dislocations is examined. The basic physical mechanisms of crystal hardening due to the interaction of mobile dislocations with forest dislocations, barriers of the Lomer-Cottrell type and grain boundaries are taken into account. The softening mechanisms associated with recovery and recrystallization are described. The paper considers the modification of a physical two-level model describing the high-temperature deformation of duplex steels. A mathematical formulation for each level is presented. An algorithm for numerical implementation of the proposed model is given. Simulation results are in good qualitative agreement with experimental data.

*Key words:* crystal plasticity, duplex steels, softening of slip systems, dynamic recovery, recrystallization

### 1. Введение

В настоящее время актуальной проблемой является построение моделей пластического деформирования, основанных на явном рассмотрении реализующих его физических механизмов на масштабных уровнях, более низких, чем макроскопический уровень. Как известно из экспериментальных исследований поликристаллических материалов, основной носитель пластической деформации — краевые дислокации, а их консервативное движение (скольжение) преобладает среди механизмов неупругого деформирования [1–3 и другие].

Упругопластическое поведение кристаллов в значительной степени зависит от температуры. Так, ее повышение активизирует множество процессов, например таких, как диффузионный массоперенос, межзеренное скольжение, миграция границ зерен, динамическая рекристаллизация, динамический возврат, фазовые переходы и других, влияющих на неупругое деформирование материала. При понижении же температуры релаксация упругих напряжений в зерне осуществляется главным образом двойникованием. Включение в рассмотрение того или иного механизма неупругого деформирования и его учет

при моделировании тесно связан с целями и задачами предполагаемого исследования. Краткий обзор существующих моделей, позволяющих описывать различные механизмы неупругого деформирования и сопровождающую их эволюцию микроструктуры материала, а также подходов к их построению можно найти в работах [4–6].

В последние десятилетия в нефтеперерабатывающей, целлюлозно-бумажной, фармацевтической, химической, пищевой промышленности и многих других областях широкое применение нашли двухфазные аустенитно-ферритные (дуплекс) стали. Эти поликристаллические материалы состоят из примерно равных объемных долей аустенита и феррита (их соотношение может варьироваться в пределах 40–60%) [7, 8]. Физико-механические свойства дуплекс сталей являются уникальными по отношению к отдельным фазам поликристалла, то есть ни аустенитная, ни ферритная фаза в отдельности подобными свойствами не обладает. К числу таких свойств можно отнести высокую прочность, вязкость и устойчивость к коррозии. Сосуществование двух фаз приводит к различию пластической деформации на разных стадиях деформирования: при низких и умеренных температурах пластическая деформация начинается в аустенитной фазе, поскольку здесь начальные критические напряжения на системах скольжения (СС) в несколько раз ниже соответствующих напряжений в феррите [9]; при высокотемпературной деформации, напротив, аустенитная фаза характеризуется большей жесткостью по сравнению с мягкой ферритной фазой, поэтому пластическая деформация начинается в феррите, но на более поздних стадиях деформирования практически вся пластическая деформация осуществляется в аустенитной фазе. В первую очередь это объясняется влиянием на подвижность дислокаций при повышенных температурах энергии дефекта упаковки (ЭДУ) [10, 11]: у ферритной фазы она более высокая, что позволяет дислокациям с меньшими энергетическими затратами преодолевать препятствия путем поперечного скольжения и переползания, а динамический возврат препятствует упрочнению фазы [8, 11, 12 и другие]. Аустенитная фаза имеет более низкую ЭДУ, что делает дислокации менее подвижными и препятствует динамическому возврату, но при достижении некоторого критического значения интенсивности пластической деформации в кристаллите происходит рекристаллизация [11, 13, 14].

Неупругое поведение дуплекс сталей, как и большинства поликристаллических материалов, существенно зависит от температуры, при которой реализуется деформирование. При фиксированной скорости деформации повышение температуры ведет к снижению напряжения пластического течения, а увеличение скорости, наоборот, — к увеличению напряжения течения [8, 11]. Кристаллы, подвергнутые деформационному упрочнению при неупругом деформировании, способны к восстановлению своих пластических свойств. Это явление носит название динамического возврата и обычно свойственно кристаллам, в которых пластическое деформирование осуществляется одиночным скольжением на предшествующей стадии деформирования, а множественное скольжение или появление расщепленных дислокаций приводит к образованию сеток дислокаций, устойчивых и при высоких температурах [1, 2].

Рекристаллизация, в отличие от возврата, приводит к практически полному восстановлению механических и физических свойств до значений недеформированного кристалла и представляет собой процесс зарождения и роста кристаллов. Ее физический механизм предполагает возникновение зародышей новых кристаллов [1], которые начинают расти в деформированном металле, когда температура становится достаточно высокой, и постепенно поглощают «старые» зерна. Рекристаллизация протекает быстрее возврата, и ее скорость тем выше, чем выше температура. Зародыши кристаллов возникают обычно в зонах повышенной энергии — в тройных стыках, на границах зерен, межфазных границах, двойниках, в областях сильных искажений, высокой плотности дислокаций, заметного изменения ориентировки кристаллов [2].

В силу того, что скольжение дислокаций лидирует среди механизмов пластического деформирования и реализуется в большинстве кристаллических тел, в том числе в дуплекс сталях, отметим основные аспекты влияния температуры на подвижность дислокаций:

1. При умеренных и повышенных гомологических температурах в результате тепловых флуктуаций на дислокациях образуются ступеньки и перегибы, которые имеют двойственное значение для движения дислокаций. С одной стороны, длина дислокационной линии увеличивается, вследствие чего повышается сопротивление движению дислокаций. С другой стороны, ступеньки и перегибы являются элементами тонкой структуры дислокации, облегчающими преодоление барьеров различной природы внутри кристаллита [1, 2].
2. Повышение температуры способствует активации диффузионных процессов и, как следствие, влияния точечных дефектов (вакансий, межузельных атомов) на подвижность дислокаций. Происходит торможение дислокаций атмосферами растворенных атомов, барьерами типа Ломера–Коттрелла, Снука и Сузуки (в зависимости от типа кристаллической решетки) [3].
3. Понижение температуры вызывает снижение ЭДУ и появление расщепленных дислокаций, которые в свою очередь ведут к возникновению двойникоующих дислокаций и барьеров дислокационной природы [15].
4. Тепловое движение может привести к росту интенсивности взаимодействия дислокаций между собой и с другими дефектами кристаллической решетки.

## 2. Конститутивная модель неупругого деформирования двухфазных материалов с учетом влияния температуры

Существуют очевидные сложности построения моделей для описания упругопластического деформирования многофазных материалов, связанные с наличием двух и более значительно отличающихся по своим свойствам фаз, которые, помимо всего прочего, при деформировании взаимодействуют друг с другом. Поскольку в обсуждаемом классе материалов протекающие процессы весьма разнообразны и сложны, для формулировки и применения макрофеноменологических моделей требуется огромное число корректно поставленных, грамотно проведенных и тщательно обработанных натуральных экспериментов. В силу этого перспективным является построение моделей пластического деформирования, основанных на введении внутренних переменных [16], отражающих изменение внутренней (мезо- и микро-) структуры материала, которая в конечном итоге и обуславливает макросвойства материала.

В рамках физического подхода к неупругому деформированию для корректного учета сопутствующих ему реальных физических механизмов необходимо изучить поведение материала на более низких, чем макроуровень, масштабных уровнях. Эффективный путь решения этой задачи видится в создании и применении многоуровневых моделей [17]. При использовании скольжения краевых дислокаций как основного механизма пластической деформации обычно достаточно взять два масштабных уровня [18].

В настоящей работе рассматривается двухуровневая модель, в которой элементом мезоуровня служит отдельный кристаллит (зерно, фаза), а элементом макроуровня — представительный объем (ПО) поликристалла (совокупность кристаллитов, достаточная для статистического осреднения). Далее параметры макроуровня обозначаются заглавными буквами, параметры мезоуровня — аналогичными строчными буквами. Каждый кристаллит представляется отдельной фазой, обладающей своим типом решетки, упругими модулями, набором СС и параметрами, характеризующими упрочнение и разупрочнение. Граница кристаллита аппроксимируется плоскими участками — фасетками, определяемыми внешней нормалью  $\mathbf{q}^{(m)}$ . Для упрощения принимается гипотеза, что в отсчетной конфигурации все кристаллиты имеют форму шестигранников (для простоты — прямоугольных параллелепипедов) примерно равного объема.

Элементы различных масштабных уровней связаны посредством расширенной гипотезы Фойгта, согласно которой предполагается однородность полного градиента скорости перемещений в рамках ПО макроуровня:

$$\hat{\nabla} \mathbf{v}^{(n)}(t) = \hat{\nabla} \mathbf{V}(t) \quad (n = \overline{1, N}), \quad (1)$$

где  $N$  — число кристаллитов, входящих в ПО;  $\hat{\nabla} \mathbf{v}^{(n)}(t)$ ,  $\hat{\nabla} \mathbf{V}(t)$  — градиенты скорости перемещений  $n$ -го кристаллита и ПО поликристалла в момент времени  $t$  соответственно. Напомним, что тензор деформации скорости  $\mathbf{D}$  — это симметричная часть градиента скорости перемещений  $\hat{\nabla} \mathbf{V}$ , а тензор вихря  $\mathbf{W}$  — кососимметричная:

$$\mathbf{D}(t) = \frac{1}{2}(\hat{\nabla} \mathbf{V}(t)^T + \hat{\nabla} \mathbf{V}(t)), \quad \mathbf{W}(t) = \frac{1}{2}(\hat{\nabla} \mathbf{V}(t)^T - \hat{\nabla} \mathbf{V}(t)). \quad (2)$$

В силу принятой гипотезы (1) для отмеченных выше величин, относящихся к различным масштабным уровням, справедливой является связь:

$$\mathbf{d}^{(n)}(t) = \mathbf{D}(t), \quad \mathbf{w}^{(n)}(t) = \mathbf{W}(t) \quad (n = \overline{1, N}). \quad (3)$$

В дальнейшем для краткости индекс  $n$  номера кристаллита опускается. В качестве определяющего соотношения для каждого масштабного уровня используется закон Гука в скоростной релаксационной форме:

$$\begin{aligned} \Sigma^r &= \mathbf{P} : (\mathbf{D} - \mathbf{D}^{in} - \mathbf{D}^{th}), & \Sigma^r &= \dot{\Sigma} - \Omega \cdot \Sigma + \Sigma \cdot \Omega, & 1 \\ \sigma^r &= \mathbf{n} : (\mathbf{d} - \mathbf{d}^{in} - \mathbf{d}^{th}), & \sigma^r &= \dot{\sigma} - \omega \cdot \sigma + \sigma \cdot \omega, & 2 \end{aligned} \quad (4)$$

где индекс « $r$ » означает не зависящую от выбора системы отсчета производную (обычно коротационную);  $\Sigma(\sigma)$  — тензоры напряжений Коши макроуровня (мезоуровня);  $\mathbf{P}(\mathbf{n})$  — тензоры четвертого ранга упругих модулей макроуровня (мезоуровня);  $\Omega(\omega)$  — тензоры спина, характеризующие квазитвердое

движение на соответствующем уровне;  $\mathbf{D}^e(\mathbf{d}^e)$ ,  $\mathbf{D}^{in}(\mathbf{d}^{in})$  и  $\mathbf{D}^{th}(\mathbf{d}^{th})$  — упругие, неупругие и температурные составляющие тензора деформации скорости  $\mathbf{D}(\mathbf{d})$  макроуровня (мезоуровня).

В соотношениях (4) полагается, что справедлива гипотеза аддитивности упругих, неупругих и температурных составляющих тензора деформации скорости на рассматриваемых масштабах:

$$\mathbf{D} = \mathbf{D}^e + \mathbf{D}^{in} + \mathbf{D}^{th}, \quad \mathbf{d} = \mathbf{d}^e + \mathbf{d}^{in} + \mathbf{d}^{th}. \quad (5)$$

Неупругая составляющая тензора деформации скорости кристаллита  $\mathbf{d}^{in}$  описывает пластическое деформирование за счет скольжения краевых дислокаций и представляет собой сумму скоростей сдвигов по активным системам скольжения (СС):

$$\mathbf{d}^{in} = \sum_{k=1}^{N_k} \frac{1}{2} \dot{\gamma}_s^{(k)} (\hat{\mathbf{n}}^{(k)} \hat{\mathbf{b}}^{(k)} + \hat{\mathbf{b}}^{(k)} \hat{\mathbf{n}}^{(k)}), \quad (6)$$

где  $\hat{\mathbf{n}}^{(k)}$  — единичная нормаль  $k$ -й плоскости скольжения в актуальной конфигурации ( $\hat{\mathbf{n}}^{(k)} = \mathbf{o} \cdot \mathbf{n}^{(k)}$ ;  $\mathbf{o}$  — тензор ротации кристаллита относительно неподвижной лабораторной системы координат);  $\hat{\mathbf{b}}^{(k)}$  — единичный вектор по направлению вектора Бюргерса  $k$ -й СС в актуальной конфигурации ( $\hat{\mathbf{b}}^{(k)} = \mathbf{o} \cdot \mathbf{b}^{(k)}$ );  $\mathbf{n}^{(k)}$ ,  $\mathbf{b}^{(k)}$  — аналогичные векторы в отсчетной конфигурации;  $\dot{\gamma}_s^{(k)}$  — скорость сдвига по  $k$ -й СС.

Полагается, что в пределах кристаллита температура  $\theta$  однородно распределена по объему, а температура поликристалла  $\Theta$  определяется путем осреднения соответствующей величины с мезоуровня. Температурная составляющая тензора деформации скорости  $\mathbf{d}^{th}$  для кристаллов удовлетворяет соотношению:

$$\mathbf{d}^{th} = \dot{\theta} \mathbf{h}, \quad (7)$$

где  $\mathbf{h}$  — тензор второго ранга термического расширения материала, компоненты которого в кристаллографической системе координат для кристаллов с ортотропной симметрией могут быть представлены в виде:

$$\mathbf{h} = \alpha_1 \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_1 + \alpha_2 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_2 + \alpha_3 \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_3; \quad (8)$$

$\mathbf{k}_i$  — ортонормированный базис кристаллографической системы координат;  $\alpha_i$  — коэффициенты теплового расширения вдоль соответствующих осей кристалла, которые в общем случае зависят от температуры; для кубического кристалла ( $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = \alpha$ ) тензор термического расширения является шаровым:

$$\mathbf{h} = \alpha (\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_3) = \alpha \mathbf{E}. \quad (9)$$

Необходимо подчеркнуть, что, несмотря на принятые гипотезы, согласно которым тензоры деформации скорости каждого кристаллита в каждый момент деформирования равняются полному тензору деформации скорости представительного макрообъема, составляющие тензора  $\mathbf{d}$  ( $\mathbf{d}^e$ ,  $\mathbf{d}^{in}$  и  $\mathbf{d}^{th}$  — соответственно упругие, неупругие и температурные) в каждом кристаллите могут быть отличными друг от друга в силу анизотропии физико-механических и теплофизических свойств и различной ориентации кристаллитов.

Интенсивные пластические деформации приводят к диссипации механической энергии и, следовательно, изменению температуры материала. Важно, что рассматриваются квазистатические процессы, протекающие достаточно медленно с точки зрения влияния сил инерции, но в то же время настолько быстрые, что существенный теплообмен рассматриваемого объема с окружающей средой не успевает произойти; это позволяет использовать адиабатические условия.

При упругопластическом деформировании можно пренебречь изменением объема, тогда мощность пластических деформаций кристаллита имеет вид:

$$\dot{q}' = \frac{1}{\hat{\rho}} \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{d}^{in} = \frac{1}{\hat{\rho}} \boldsymbol{\sigma} : \sum_{k=1}^{N_k} \frac{1}{2} \dot{\gamma}_s^{(k)} (\hat{\mathbf{n}}^{(k)} \hat{\mathbf{b}}^{(k)} + \hat{\mathbf{b}}^{(k)} \hat{\mathbf{n}}^{(k)}) = \frac{1}{\hat{\rho}} \sum_{k=1}^{N_k} \dot{\gamma}_s^{(k)} \tau_s^{(k)}, \quad (10)$$

где  $\tau_s^{(k)}$  — сдвиговые напряжения в  $k$ -й СС, которые вычисляются согласно формуле

$$\boldsymbol{\tau}_s^{(k)} = \boldsymbol{\sigma} : \hat{\mathbf{b}}^{(k)} \hat{\mathbf{n}}^{(k)}. \quad (11)$$

В случае адиабатических условий скорость изменения температуры может быть установлена из соотношения:

$$\dot{\theta} = \frac{\beta}{\hat{\rho} c_v} \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{d}^{in} = \frac{\beta}{\hat{\rho} c_v} \sum_{k=1}^{N_k} \dot{\gamma}^{(k)} \boldsymbol{\tau}_s^{(k)}, \quad (12)$$

где  $\hat{\rho}$  — плотность материала;  $c_v$  — теплоемкость при постоянном объеме;  $\beta$  — коэффициент выхода тепла, определяемый из экспериментальных данных, которые свидетельствуют о том, что не вся работа пластических деформаций переходит в тепло — часть запасается в материале.

### 2.1. Согласование определяющих соотношений различных масштабных уровней

Отметим, что согласно подходу, предложенному в [17], в соотношении (4) не конкретизируется вид тензоров  $\boldsymbol{\Omega}$  и  $\boldsymbol{\omega}$ , в частности не накладывается условие антисимметричности; необходимым условием является только независимость от системы отсчета ассоциированных с этими тензорами производных для обеспечения выполнения материальной индифферентности определяющих уравнений (4) [17]. Тензоры  $\boldsymbol{\Omega}$ ,  $\boldsymbol{\omega}$  характеризуют вращения подвижных систем отсчета для элементов макро- и мезоуровней; в качестве таких систем удобно использовать жесткие (недеформируемые) системы координат, которые будут характеризовать квазитвердое движение и относительно которых будут находиться деформации от внешних воздействий.

Представим величины, входящие в описание напряженно-деформированного состояния элемента нижнего уровня, в виде суммы средних по представительному макрообъему величин и отклонений от этих средних [17]:

$$\begin{aligned} \mathbf{n} &= \langle \mathbf{n} \rangle + \mathbf{n}', & \boldsymbol{\sigma} &= \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle + \boldsymbol{\sigma}', & \mathbf{d} &= \langle \mathbf{d} \rangle + \mathbf{d}', & \dot{\theta} &= \langle \dot{\theta} \rangle + \dot{\theta}' \\ \mathbf{d}^{in} &= \langle \mathbf{d}^{in} \rangle + \mathbf{d}^{in'}, & \mathbf{d}^{th} &= \langle \mathbf{d}^{th} \rangle + \mathbf{d}^{th'}, & \boldsymbol{\omega} &= \langle \boldsymbol{\omega} \rangle + \boldsymbol{\omega}', \end{aligned} \quad (13)$$

где  $\langle \cdot \rangle$  — оператор осреднения, обладающий свойством:

$$\langle \mathbf{n}' \rangle = \mathbf{0}, \quad \langle \boldsymbol{\sigma}' \rangle = \mathbf{0}, \quad \langle \mathbf{d}' \rangle = \mathbf{0}, \quad \langle \dot{\theta}' \rangle = 0, \quad \langle \mathbf{d}^{in'} \rangle = \mathbf{0}, \quad \langle \mathbf{d}^{th'} \rangle = \mathbf{0}, \quad \langle \boldsymbol{\omega}' \rangle = \mathbf{0}. \quad (14)$$

Вид оператора осреднения в работе не обсуждается, например, может использоваться осреднение или по объему, или в пространстве ориентаций решеток кристаллитов; для оператора осреднения важно лишь выполнение свойства (14).

Подставим (13) в определяющие соотношения низшего масштабного уровня (4)<sub>2</sub> и рассмотрим правую часть этого соотношения, которую обозначим как  $\mathbf{R}$ :

$$\begin{aligned} \mathbf{R} &= (\langle \mathbf{n} \rangle + \mathbf{n}') : (\langle \mathbf{d} \rangle + \mathbf{d}' - \langle \mathbf{d}^{in} \rangle - \mathbf{d}^{in'} - \langle \mathbf{d}^{th} \rangle - \mathbf{d}^{th'}) = \\ &= \langle \mathbf{n} \rangle : \langle \mathbf{d} \rangle + \langle \mathbf{n} \rangle : \mathbf{d}' - \langle \mathbf{n} \rangle : \langle \mathbf{d}^{in} \rangle - \langle \mathbf{n} \rangle : \mathbf{d}^{in'} - \langle \mathbf{n} \rangle : \langle \mathbf{d}^{th} \rangle - \langle \mathbf{n} \rangle : \mathbf{d}^{th'} + \mathbf{n}' : \langle \mathbf{d} \rangle + \mathbf{n}' : \mathbf{d}' - \\ &\quad - \mathbf{n}' : \langle \mathbf{d}^{in} \rangle - \mathbf{n}' : \mathbf{d}^{in'} - \mathbf{n}' : \langle \mathbf{d}^{th} \rangle - \mathbf{n}' : \mathbf{d}^{th'}. \end{aligned} \quad (15)$$

Применяя оператор осреднения к соотношению (15), в результате получим:

$$\langle \mathbf{R} \rangle = \langle \mathbf{n} \rangle : \langle \mathbf{d} \rangle - \langle \mathbf{n} \rangle : \langle \mathbf{d}^{in} \rangle - \langle \mathbf{n} \rangle : \langle \mathbf{d}^{th} \rangle + \langle \mathbf{n}' : \mathbf{d}' \rangle - \langle \mathbf{n}' : \mathbf{d}^{in'} \rangle - \langle \mathbf{n}' : \mathbf{d}^{th'} \rangle. \quad (16)$$

Запишем левую часть  $\mathbf{L}$  уравнения (4)<sub>2</sub> с учетом представления (13):

$$\begin{aligned} \mathbf{L} &= \langle \dot{\boldsymbol{\sigma}} \rangle + \dot{\boldsymbol{\sigma}}' - (\langle \boldsymbol{\omega} \rangle + \boldsymbol{\omega}') \cdot (\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle + \boldsymbol{\sigma}') + (\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle + \boldsymbol{\sigma}') \cdot (\langle \boldsymbol{\omega} \rangle + \boldsymbol{\omega}') = \\ &= \langle \dot{\boldsymbol{\sigma}} \rangle + \dot{\boldsymbol{\sigma}}' - \langle \boldsymbol{\omega} \rangle \cdot \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle - \langle \boldsymbol{\omega} \rangle \cdot \boldsymbol{\sigma}' - \boldsymbol{\omega}' \cdot \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle - \boldsymbol{\omega}' \cdot \boldsymbol{\sigma}' + \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle \cdot \langle \boldsymbol{\omega} \rangle + \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle \cdot \boldsymbol{\omega}' + \boldsymbol{\sigma}' \cdot \langle \boldsymbol{\omega} \rangle + \boldsymbol{\sigma}' \cdot \boldsymbol{\omega}'. \end{aligned}$$

После осреднения придем к выражению:

$$\langle \mathbf{L} \rangle = \langle \dot{\boldsymbol{\sigma}} \rangle - \langle \boldsymbol{\omega} \rangle \cdot \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle - \langle \boldsymbol{\omega}' \cdot \boldsymbol{\sigma}' \rangle + \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle \cdot \langle \boldsymbol{\omega} \rangle + \langle \boldsymbol{\sigma}' \cdot \boldsymbol{\omega}' \rangle. \quad (17)$$

Приравнивание (16) и (17) дает

$$\begin{aligned} & \langle \dot{\boldsymbol{\sigma}} \rangle - \langle \boldsymbol{\omega} \rangle \cdot \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle - \langle \boldsymbol{\omega}' \cdot \boldsymbol{\sigma}' \rangle + \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle \cdot \langle \boldsymbol{\omega} \rangle + \langle \boldsymbol{\sigma}' \cdot \boldsymbol{\omega}' \rangle = \\ & = \langle \mathbf{n} \rangle : \langle \mathbf{d} \rangle - \langle \mathbf{n} \rangle : \langle \mathbf{d}^{in} \rangle - \langle \mathbf{n} \rangle : \langle \mathbf{d}^{th} \rangle + \langle \mathbf{n}' \rangle : \langle \mathbf{d}' \rangle - \langle \mathbf{n}' \rangle : \langle \mathbf{d}'^{in} \rangle - \langle \mathbf{n}' \rangle : \langle \mathbf{d}'^{th} \rangle. \end{aligned} \quad (18)$$

Примем, что параметры соседних масштабных уровней связываются между собой согласно формулам

$$\mathbf{\Pi} = \langle \mathbf{n} \rangle, \quad \mathbf{D} = \langle \mathbf{d} \rangle, \quad \mathbf{\Sigma} = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle, \quad \mathbf{\Omega} = \langle \boldsymbol{\omega} \rangle, \quad \dot{\Theta} = \langle \dot{\theta} \rangle. \quad (19)$$

Подставляя (19) в уравнение (18), имеем:

$$\begin{aligned} & \dot{\mathbf{\Sigma}} - \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{\Sigma} - \langle \boldsymbol{\omega}' \cdot \boldsymbol{\sigma}' \rangle + \mathbf{\Sigma} \cdot \mathbf{\Omega} + \langle \boldsymbol{\sigma}' \cdot \boldsymbol{\omega}' \rangle = \\ & = \mathbf{\Pi} : \mathbf{D} - \mathbf{\Pi} : \langle \mathbf{d}^{in} \rangle - \mathbf{\Pi} : \langle \mathbf{d}^{th} \rangle + \langle \mathbf{n}' \rangle : \langle \mathbf{d}' \rangle - \langle \mathbf{n}' \rangle : \langle \mathbf{d}'^{in} \rangle - \langle \mathbf{n}' \rangle : \langle \mathbf{d}'^{th} \rangle. \end{aligned} \quad (20)$$

Легко убедиться, что условиями согласования определяющих соотношений мезо- и макроуровней (4) являются следующие:

$$\begin{aligned} \mathbf{D}^{in} &= \langle \mathbf{d}^{in} \rangle - \mathbf{\Pi}^{-1} : \langle \mathbf{n}' \rangle : \langle \mathbf{d}'^{in} \rangle + \mathbf{\Pi}^{-1} : (\langle \boldsymbol{\omega}' \cdot \boldsymbol{\sigma}' \rangle - \langle \boldsymbol{\sigma}' \cdot \boldsymbol{\omega}' \rangle), \\ \mathbf{D}^{th} &= \langle \mathbf{d}^{th} \rangle - \mathbf{\Pi}^{-1} : \langle \mathbf{n}' \rangle : \langle \mathbf{d}'^{th} \rangle. \end{aligned} \quad (21)$$

$$\text{или } \mathbf{D}^{in} + \mathbf{D}^{th} = \langle \mathbf{d}^{in} + \mathbf{d}^{th} \rangle - \mathbf{\Pi}^{-1} : \langle \mathbf{n}' \rangle : (\langle \mathbf{d}'^{in} + \mathbf{d}'^{th} \rangle) + \mathbf{\Pi}^{-1} : (\langle \boldsymbol{\omega}' \cdot \boldsymbol{\sigma}' \rangle - \langle \boldsymbol{\sigma}' \cdot \boldsymbol{\omega}' \rangle).$$

Таким образом, система уравнений, входящих в математическую постановку задачи неупругого деформирования элемента макроуровня (ПО поликристалла), имеет вид, аналогичный приведенному в работе [17]:

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{\mathbf{\Sigma}} = \mathbf{\Pi} : (\mathbf{D} - \mathbf{D}^{in} - \mathbf{D}^{th}) + \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{\Sigma} - \mathbf{\Sigma} \cdot \mathbf{\Omega}, \\ \mathbf{\Pi} = \langle \mathbf{n} \rangle, \quad \mathbf{\Omega} = \langle \boldsymbol{\omega} \rangle, \quad \dot{\Theta} = \langle \dot{\theta} \rangle, \\ \mathbf{D}^{in} + \mathbf{D}^{th} = \langle \mathbf{d}^{in} + \mathbf{d}^{th} \rangle + \mathbf{\Pi}^{-1} : \langle \mathbf{n}' \rangle : (\langle \mathbf{d}'^{in} + \mathbf{d}'^{th} \rangle) + \mathbf{\Pi}^{-1} : (\langle \boldsymbol{\sigma}' \cdot \boldsymbol{\omega}' \rangle - \langle \boldsymbol{\omega}' \cdot \boldsymbol{\sigma}' \rangle), \\ \hat{\mathbf{V}} \mathbf{v}(t) = \hat{\mathbf{V}} \mathbf{v}(t)_{\text{пред}}, \end{array} \right. \quad (22)$$

где уравнения (22)<sub>1</sub> — это определяющие соотношения, (22)<sub>2</sub>, (22)<sub>3</sub> — замыкающие соотношения модели макроуровня [16, 18], а (22)<sub>4</sub> — кинематическое соотношение, которое описывает внешнее воздействие; в качестве эволюционных уравнений выступают соотношения модели мезоуровня. Здесь:  $\mathbf{n}'$ ,  $\boldsymbol{\sigma}'$ ,  $\boldsymbol{\omega}'$  — отклонения указанных величин в элементах мезоуровня от средних по представительному макрообъему (флуктуационные слагаемые). Явными внутренними переменными макроуровня [16] служат: тензор упругих свойств  $\mathbf{\Pi}$ , неупругая ( $\mathbf{D}^{in}$ ) и температурная ( $\mathbf{D}^{th}$ ) составляющие тензора деформации скорости, тензор спина макроуровня  $\mathbf{\Omega}$ , скорость изменения температуры материала на макроуровне  $\dot{\Theta}$ . К числу неявных внутренних переменных макроуровня относятся: тензор спина решетки  $\boldsymbol{\omega}$ , упругие модули  $\mathbf{n}$ , неупругая ( $\mathbf{d}^{in}$ ) и температурная ( $\mathbf{d}^{th}$ ) составляющие тензора деформации скорости элементов мезоуровня, температура материала  $\theta$ .

Замкнутая математическая постановка задачи неупругого деформирования на мезоуровне представима в виде (индекс номера кристаллита опущен):

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{n} : (\mathbf{d} - \mathbf{d}^{in} - \mathbf{d}^{th}) + \boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\omega}, \\ \hat{\mathbf{V}} \mathbf{v} = \hat{\mathbf{V}} \mathbf{V}, \quad \mathbf{d} = (\hat{\mathbf{V}} \mathbf{v} + \hat{\mathbf{V}} \mathbf{v}^T) / 2, \\ \mathbf{d}^{in} = \sum_{k=1}^{N^s} \dot{\gamma}_s^{(k)} \hat{\mathbf{m}}^{(k)}, \quad \mathbf{d}^{th} = \dot{\theta} \mathbf{h} \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} 1 \\ 2 \\ 3 \end{array}$$

$$\left. \begin{aligned}
 \boldsymbol{\omega} &= \frac{1}{2} (\hat{\nabla} \mathbf{v}^T - \hat{\nabla} \mathbf{v}) + \frac{1}{2} \sum_k^{N^s} \dot{\gamma}_s^{(k)} (\hat{\mathbf{n}}^{(k)} \hat{\mathbf{b}}^{(k)} - \hat{\mathbf{b}}^{(k)} \hat{\mathbf{n}}^{(k)}), & \boldsymbol{\omega} &= \dot{\mathbf{o}} \cdot \mathbf{o}^T, & 4 \\
 \dot{\gamma}^{(k)} &= \dot{\gamma}_s^{(k)} + \dot{\gamma}_{rt}^{(k)} + \dot{\gamma}_{rc}^{(k)}, & & & 5 \\
 \dot{\gamma}_s^{(k)} &= \dot{\gamma}_0^{(k)} \left( \frac{\tau_s^{(k)}}{\tau_c^{(k)}} \right)^{1/m} \exp \left( -\frac{\Delta G}{\kappa \theta} \right) H(\tau_s^{(k)} - \tau_c^{(k)}), & & & 6 \\
 \dot{\gamma}_{rt}^{(k)} &= -(\tau_{rt}^{(k)} / \tau_c^{(k)})^n \dot{\gamma}_0^{(k)} H(\tau_s^{(k)} - \tau_c^{(k)}), & \dot{\gamma}_{rc}^{(k)} &= -(\tau_{rc}^{(k)} / \tau_c^{(k)})^n \dot{\gamma}_0^{(k)} H(\tau_s^{(k)} - \tau_c^{(k)}) & 7 \\
 \dot{\theta} &= \frac{\beta}{\hat{\rho} c_v} \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{d}^{in}, & & & 8 \quad (23) \\
 \dot{\tau}_c^{(k)} &= \dot{\tau}_{st}^{(k)} + \dot{\tau}_{sp}^{(k)} + \dot{\tau}_d^{(k)} + \dot{\tau}_{rt}^{(k)} + \dot{\tau}_{rc}^{(k)}, & & & 9 \\
 \dot{\tau}_{st}^{(k)} &= \tau_{c0}^{(k)} \left( \frac{\sum_{i=1}^{N_s} h_i^{(k)} \left( \frac{\gamma^{(i)}}{\sum_{i=1}^{N_s} \gamma^{(i)}} \right) \dot{\gamma}^{(i)}}{\left( \sum_{i=1}^{N_s} \gamma^{(i)} \right)^\delta} \right), & \dot{\tau}_d^{(j)} &= \eta \sum_{k=1}^{K_f} \frac{S_k}{S} \sum_{s=1}^{K_s} \xi_{(i,m)}^{(s,k)} \dot{\gamma}^{(s)} a^{(j,s)} \tau_b^{*(s)}, & 10 \\
 \dot{\tau}_{sp}^{(k)} &= \xi_1 \tau_{sp}^{(k)} \left( 1 - \frac{\delta_{\Delta D Y}}{\delta_{\Delta D Y}^*} \right) H \left( 1 - \frac{\delta_{\Delta D Y}}{\delta_{\Delta D Y}^*} \right) \left( \int_0^t \dot{\tau}_{sp}^{(k)} d\tau + f_0^{(k)} \right)^{-1} \dot{\gamma}^{(k)} \left( \sum_{i \neq i}^{N^s} \gamma^{(i)} + \gamma_0^b \right), & & & 11 \\
 \dot{\tau}_{rt}^{(k)} &= -\eta_{rt} \tau_c^{(k)} \dot{\gamma}_s^{(k)} < \frac{\theta}{\theta_{rt}^*} - 1 > < \frac{\delta_{\Delta D Y}}{\delta_{\Delta D Y}^*} - 1 > \exp \left( -\frac{Q_d}{\kappa \theta} \right), & & & 12 \\
 \dot{\tau}_{rc}^{(k)} &= -\eta_{rc} \tau_c^{(k)} \dot{\gamma}_s^{(k)} < \frac{\theta}{\theta_{rc}^*} - 1 > < \frac{\varepsilon_u^{in}}{\varepsilon_u^{*in}} - 1 > \exp \left( -\frac{Q_d}{\kappa \theta} \right). & & & 13
 \end{aligned} \right\}$$

Здесь: (23)<sub>1</sub> — закон Гука в скоростной релаксационной форме с учетом геометрической нелинейности; (23)<sub>2</sub> — расширенная гипотеза Фойгта и определение тензора деформаций скорости мезоуровня; (23)<sub>3</sub> — кинематические соотношения для неупругой и температурной составляющих тензора деформации скорости;  $(\hat{\mathbf{m}}^{(k)} = \frac{1}{2} (\hat{\mathbf{b}}^{(k)} \hat{\mathbf{n}}^{(k)} + \hat{\mathbf{n}}^{(k)} \hat{\mathbf{b}}^{(k)})$  — ориентационный тензор  $k$ -й СС); (23)<sub>4</sub> — соотношение модели поворота Тейлора, где  $\mathbf{o}$  — тензор, совмещающий неподвижную лабораторную систему координат с кристаллографической; (23)<sub>5</sub> — гипотеза аддитивности скорости пластических сдвигов, характеризующих дефектную структуру материала рассматриваемой СС, то есть равенства скорости сумме частей, обусловленных скольжением дислокаций  $\dot{\gamma}_s^{(k)}$ , динамическим возвратом  $\dot{\gamma}_{rc}^{(k)}$  и рекристаллизацией  $\dot{\gamma}_{rt}^{(k)}$ ; (23)<sub>6</sub> — вязкопластическое соотношение для скоростей сдвига ( $H$  — функция Хэвисайда); (23)<sub>7</sub> — соотношения для скоростей сдвига  $\dot{\gamma}_{rc}^{(k)}$  и  $\dot{\gamma}_{rt}^{(k)}$ ; (23)<sub>8</sub> — соотношение для скорости изменения температуры кристаллита; (23)<sub>9</sub> — гипотеза аддитивности скоростей критических напряжений рассматриваемой СС, то есть определение их как сумм составляющих, описывающих взаимодействие подвижных дислокаций с дислокациями леса  $\dot{\tau}_{st}^{(k)}$ , с дислокационными барьерами типа Ломера–Коттрелла  $\dot{\tau}_{sp}^{(k)}$  [19], с границей кристаллита  $\dot{\tau}_d^{(k)}$  [20], вкладов от динамического возврата  $\dot{\tau}_{rt}^{(k)}$  и рекристаллизации  $\dot{\tau}_{rc}^{(k)}$ ; (23)<sub>10</sub>, (23)<sub>11</sub> — соотношения для составляющих  $\dot{\tau}_{st}^{(k)}$ ,  $\dot{\tau}_d^{(k)}$ ,  $\dot{\tau}_{sp}^{(k)}$  скоростей критических напряжений  $\dot{\tau}_c^{(k)}$ ; (23)<sub>12</sub> и (23)<sub>13</sub> — соотношения для скоростей изменения критических напряжений, вызываемых динамическим возвратом  $\dot{\tau}_{rt}^{(k)}$  и рекристаллизацией  $\dot{\tau}_{rc}^{(k)}$ , где  $\langle \cdot \rangle$  — скобки Мак-Кэлли,  $\langle x \rangle = \max(0, x)$ .

Закон Гука (23)<sub>1</sub> есть определяющее соотношение, включающее четыре явные внутренние переменные мезоуровня: скорости неупругих ( $\mathbf{d}^{in}$ ) и температурных ( $\mathbf{d}^{th}$ ) деформаций, спин решетки  $\boldsymbol{\omega}$  и тензор упругих характеристик  $\mathbf{n}$ . К неявным внутренним переменным относятся скорости критических напряжений сдвига, скорости сдвигов, параметры взаимодействия систем скольжения соседних кристаллитов и абсолютная температура  $\theta$ . Эволюционными уравнениями являются соотношения законов упрочнения (23)<sub>9</sub>–(23)<sub>13</sub>, соотношения для скоростей сдвига (23)<sub>5</sub>–(23)<sub>7</sub> и соотношение для скорости изменения температуры (23)<sub>8</sub>. Роль замыкающих уравнений, связывающих внутренние явные переменные с параметрами внешнего воздействия и внутренними неявными переменными, играют кинематическое соотношение (23)<sub>3</sub> и соотношение модели поворота Тейлора (23)<sub>4</sub>. Соотношение (23)<sub>2</sub> определяет внешние воздействия на мезоуровне, передаваемые с макроуровня. Не названные в этом разделе соотношения и обозначения из системы (23) будут конкретизированы ниже по тексту.

## 2.2. Описание упрочнения систем скольжения

Принимается гипотеза аддитивности скоростей критических напряжений сдвига  $\dot{\tau}_c^{(k)}$  по различным механизмам упрочнения и разупрочнения [19]. В рамках настоящей работы учитываются три физических механизма упрочнения: за счет торможения мобильных дислокаций дислокациями леса и барьерами дислокационной природы, появляющимися вследствие взаимодействия расщепленных дислокаций (барьерами типа Ломера–Коттрелла), и границами зерен. Заметим, что повышение температуры приводит к уменьшению критических напряжений СС — разупрочнению материала, связанному в дуплекс сталях с процессами возврата в ферритной фазе [8, 11, 12 и другие] и рекристаллизации в аустенитной фазе [11, 13, 14]. В итоге скорости критических напряжений рассматриваемой СС можно представить в виде:

$$\dot{\tau}_c^{(k)} = \dot{\tau}_{st}^{(k)} + \dot{\tau}_{sp}^{(k)} + \dot{\tau}_d^{(k)} + \dot{\tau}_{rt}^{(k)} + \dot{\tau}_{rc}^{(k)}, \quad (24)$$

где  $\dot{\tau}_{st}^{(k)}$ ,  $\dot{\tau}_{sp}^{(k)}$ ,  $\dot{\tau}_d^{(k)}$  — составляющие скорости критических напряжений  $k$ -й СС, отражающие упрочнение кристалла, обусловленное торможением мобильных дислокаций дислокациями леса, барьерами Ломера–Коттрелла и границами зерен соответственно;  $\dot{\tau}_{rt}^{(k)}$ ,  $\dot{\tau}_{rc}^{(k)}$  — составляющие скорости критических напряжений  $k$ -й СС, описывающие разупрочнение кристалла за счет процессов динамического возврата и рекристаллизации.

Пластическое деформирование вызывает эволюцию дефектной структуры мезо- и микромасштабов, которая, в первую очередь, связана с увеличением плотности дислокаций, приводящей к деформационному упрочнению — увеличению текущего напряжения течения. Почти всегда наряду с упрочнением происходит разупрочнение материала — возврат, который осуществляется за счет перестройки дефектной структуры (движения, перераспределения и аннигиляции дислокаций и точечных дефектов [2, 21]), ведущей к снижению внутренней энергии, а следовательно, и внутренних напряжений микро- и атомарного уровня.

Исходя из физического анализа назовем материальные параметры, которые требуется ввести в функцию скорости уменьшения критических напряжений при динамическом возврате. Известно [1, 2], что образование сложных сплетений дислокаций (сеток как результата дислокационных реакций), формирование субзерен и границ дислокационных по природе, препятствуют возврату в кристаллах. В этом случае возврат, вероятно, имеет место, но его возможности снижать внутреннюю энергию ограничены, поэтому он не приводит к существенному уменьшению накопленной высокой энергии. Уместно напомнить, что одним из основных физических механизмов динамического возврата является неконсервативное движение дислокаций, реализующееся за счет диффузии точечных дефектов — вакансий и межузельных атомов. В кристаллах с низкой ЭДУ ( $\delta_{эдв}$ ) этот канал релаксации напряжений ограничен, поскольку переползание расщепленных дислокаций затруднено [1]. В кристаллах же с высокой ЭДУ возврат осуществляется более интенсивно. Ряд авторов [2, 11] отмечает, что при  $\delta_{эдв}$  ниже некоторых значений возврат практически не наблюдается. Ранее говорилось, что в дуплекс сталях аустенитная фаза имеет ЭДУ, меньшую по сравнению с ферритной, чем и объясняется интенсивное протекание динамического возврата в последней.

Следующую ключевую характеристику в физическом описании динамического возврата представляет собой абсолютная температура  $\theta$ . Из результатов экспериментальных исследований известно, что ниже определенных гомологических температур возврат практически отсутствует [2]. Анализ экспериментальных данных позволяет сделать вывод, что динамический возврат начинается примерно со значения температуры, равного 0,5 гомологической температуры, и варьируется в некоторых пределах для различных марок дуплекс сталей. Поскольку процесс возврата реализуется преимущественно диффузионным путем, то он термически активируем, и в соотношение должен входить параметр диффузии — энергия активации диффузии точечных дефектов.

В [22] обнаружено, что повышенным степеням деформации, как правило, соответствуют большие плотности дислокаций. При этом плотность дефектов напрямую связана с необратимостью деформирования, в первую очередь со сдвигами, а увеличение плотности дефектов проявляется в увеличении критических напряжений СС. В свою очередь рост критических напряжений приводит к активизации механизмов релаксации. По этой причине важной мерой интенсивности процесса возврата служит степень упрочнения, которая обуславливается текущими критическими напряжениями на рассматриваемой СС  $\tau_c^{(k)}$ . Поскольку один из наиболее эффективных каналов диссипации внутренней энергии — это сдвиги, то в соотношение должна войти величина  $\dot{\gamma}_s^{(k)}$ . Тогда скорость уменьшения критических напряжений за счет возврата  $\dot{\tau}_{rt}^{(k)}$  можно найти по формуле:

$$\dot{\tau}_{rt}^{(k)} = -\eta_{rt} \tau_c^{(k)} \dot{\gamma}_s^{(k)} < \frac{\theta}{\theta_{rt}^*} - 1 > < \frac{\delta_{эдв}}{\delta_{эдв}^*} - 1 > \exp\left(-\frac{Q_d}{k\theta}\right). \quad (25)$$



Здесь:  $\theta_{\pi}^*$ ,  $\delta_{\text{ЭДУ}}^*$  — минимальные значения температуры и энергии дефекта упаковки материала, при превышении которых следует учитывать механизм разупрочнения за счет возврата;  $\eta_{\pi}$  — безразмерный параметр, устанавливаемый в ходе процедуры идентификации модели;  $Q_d$  — энергия активации диффузии.

Необходимо подчеркнуть, что динамический возврат — не единственный механизм разупрочнения, наблюдаемый в дуплекс сталях при высокотемпературном деформировании. Существенное влияние на неупругое поведение материала оказывает динамическая рекристаллизация, которая, согласно экспериментальным данным, имеет место в аустенитной фазе [8, 11, 13]. В результате рекристаллизации зарождаются и растут новые кристаллы, свободные от внутренних напряжений. Зародыши кристаллитов возникают и развиваются в деформированном металле [1] при достаточно высокой температуре за счет присоединения окружающих атомов. Рекристаллизация, в отличие от возврата, приводит к практически полному восстановлению механических и физических свойств до значений недеформированного состояния кристалла. Этот процесс протекает быстрее возврата. Зародыши новых кристаллов появляются обычно в зонах повышенной энергии — в тройных стыках, на границах зерен, на межфазных границах, в двойниках, в областях сильных искажений, высокой плотности дислокаций, заметного изменения ориентации кристалла [2].

С точки зрения авторов предлагаемой вниманию работы, построение корректной модели рекристаллизации — отдельная и весьма сложная проблема, решение которой выходит за рамки данного исследования. Вследствие этого был принят ряд упрощающих гипотез, а именно: средний размер, форма, ориентации и упругие свойства кристаллитов при рекристаллизации не изменяются. Также полагалось, что в рамках обсуждаемой постановки задачи рекристаллизация ведет к уменьшению критических напряжений СС.

Рассмотрим материальные параметры, влияющие на рекристаллизацию. В работе [2] отмечается, что чем выше степень упрочнения материала, которая отражается в критических напряжениях СС  $\tau_c^{(k)}$ , тем интенсивнее материал рекристаллизуется. Также упоминается о том, что существует некоторая минимальная пластическая деформация (критическая деформация), необходимая для начала рекристаллизации. Для чистых поликристаллических материалов такая деформация составляет 1–5%, для дуплекс сталей — 15–25%. Другой важной характеристикой процесса служит температура: для данной степени деформации рекристаллизация протекает тем интенсивнее, чем выше температура [1, 2]. Поскольку процесс активируется термически и осуществляется путем диффузии точечных дефектов, то в соотношении должны войти энергия активации диффузии  $Q_d$  и температура  $\theta$ . Тогда скорость разупрочнения за счет механизмов рекристаллизации можно описать аналогично скорости уменьшения критических напряжений за счет динамического возврата:

$$\dot{\tau}_{rc}^{(k)} = -\eta_{rc} \tau_c^{(k)} \dot{\gamma}_s^{(k)} < \frac{\theta}{\theta_{rc}^*} - 1 > < \frac{\varepsilon_u^{in}}{\varepsilon_u^{*in}} - 1 > \exp\left(-\frac{Q_d}{k\theta}\right), \quad (26)$$

где  $Q_d$  — энергия активации диффузии;  $\varepsilon_u^{in}$ ,  $\varepsilon_u^{*in}$  — интенсивности накопленных неупругих деформаций и критическая величина интенсивности неупругих деформаций, после которой необходимо учитывать процесс рекристаллизации;  $\eta_{rc}$  — безразмерный параметр, определяемый в ходе процедуры идентификации.

Известно, что в ходе рекристаллизации во вновь появившихся кристаллитах остаются дислокации [23], процесс возврата также не приводит к полной аннигиляции дислокаций, поэтому уменьшение накопленного сдвига на СС предлагается представить в виде степенных соотношений:

$$\dot{\gamma}_{\pi}^{(k)} = -\left(\tau_{\pi}^{(k)} / \tau_c^{(k)}\right)^n \dot{\gamma}_0^{(k)} H\left(\tau_s^{(k)} - \tau_c^{(k)}\right), \quad \dot{\gamma}_{rc}^{(k)} = -\left(\tau_{rc}^{(k)} / \tau_c^{(k)}\right)^n \dot{\gamma}_0^{(k)} H\left(\tau_s^{(k)} - \tau_c^{(k)}\right). \quad (27)$$

Разупрочнение и упрочнение в кристаллических материалах протекают одновременно, и если первое связано с перестройкой дефектной структуры материала, облегчающей движение дислокаций, то второе — с изменением дефектной структуры, затрудняющим движение подвижных дислокаций. Ниже приведены выражения для скоростей критических напряжений сдвига, включающие основные физические механизмы упрочнения, которые следует учитывать при моделировании данного класса материалов. Первый механизм связан с торможением мобильных дислокаций дислокациями леса.

Для описания упрочнения воспользуемся «стандартным» соотношением, которое модифицировано на случай сложного нагружения в работе [24]:

$$\dot{\tau}_{sr}^{(k)} = \tau_{sr0}^{(k)} \left( \sum_{i=1}^{N_s} h_i^{(k)} \frac{(\gamma^{(i)})^\psi \dot{\gamma}^{(i)}}{\left( \sum_{i=1}^{24} \gamma^{(i)} \right)^\delta} \right), \quad (28)$$

где  $\tau_{sr0}^{(k)}$  — начальное критическое напряжение  $k$ -й СС, выступающее как нормирующий множитель;  $N_s$  — число активных СС;  $h_i^{(k)}$  — модули упрочнения, которые делятся на коэффициенты деформационного ( $h_i^{(i)}$ ) и латентного ( $h_i^{(k)}$ ) упрочнения ( $k \neq i$ );  $\psi$  — показатель степени, отображающий нелинейность процесса упрочнения;  $\delta$  — коэффициент, который характеризует влияние истории пластического деформирования на текущее состояние дефектной структуры.

Другой важный физический механизм упрочнения СС связан с диссоциацией полных дислокаций на частичные и взаимодействием последних, приводящим к появлению труднопреодолимых для мобильных дислокаций барьеров типа Ломера–Коттрелла [1–3]. Воспользуемся соотношением, предложенным в работе [19]:

$$\dot{\tau}_{sp}^{(k)} = \xi_1 \tau_{sp}^{(k)} \left( 1 - \frac{\delta_{\text{ЭДУ}}}{\delta_{\text{ЭДУ}}^{**}} \right) H \left( 1 - \frac{\delta_{\text{ЭДУ}}}{\delta_{\text{ЭДУ}}^{**}} \right) \left( \int_0^t \dot{\tau}_{sp}^{(k)} dt + f_0^{(k)} \right)^{-1} \dot{\gamma}^{(k)} \left( \sum_{i \neq i}^{N^*} \gamma^{(i)} + \gamma_0^b \right), \quad (29)$$

где  $\delta_{\text{ЭДУ}}^{**}$  — некоторое критическое значение ЭДУ материала, при превышении которого можно пренебречь диссоциацией полных дислокаций (дислокациям становится энергетически невыгодно переходить в расщепленное состояние);  $\delta_{\text{ЭДУ}}$  — как и ранее, энергия дефекта упаковки материала;  $N^*$  — число СС, сопряженных к данной, то есть имеющих пересекающиеся с данной СС плоскости скольжения, для которых энергетически возможны реакции образования сидячих дислокаций;  $\tau_{sp}^{(i)}$  — текущее критическое напряжение в данной СС, обусловленное торможением мобильных дислокаций барьерами;  $\gamma_0^b$  — некоторая малая константа, отвечающая за начальную плотность дислокаций в сопряженных СС в недеформированном материале;  $\xi_1$  — материальная константа, определяемая в ходе процедуры идентификации.

Следующий механизм, принимаемый во внимание в настоящей работе, связан с упрочнением за счет границ кристаллитов. Подробное описание и вывод соотношения можно найти в работах [20, 25, 26]. Предлагается использовать соотношение для учета критических сдвиговых напряжений за счет такого механизма в виде:

$$\dot{\tau}_d^{(j)} = \eta \sum_{k=1}^{K_f} \frac{S_k}{S} \sum_{s=1}^{K_s} \xi_{(i,m)}^{(s,k)} \dot{\gamma}^{(s)} a^{(j,s)} \tau_b^{*(s)}, \quad (30)$$

где  $\tau_b^{*(j)}$  — положительная компонента касательных барьерных напряжений, действующих на решеточную дислокацию  $j$ -й СС со стороны дислокации ориентационного несоответствия (ДОН) [27]:

$$\tau_b^{*(j)} = \phi \frac{\mu b_{ed}^{(j)} \log(2a/R)}{2\pi R(\nu-1)}, \quad (31)$$

здесь  $a$  — параметр решетки кристаллита;  $R$  — характерный размер кристаллита;  $\nu$  — коэффициент Пуассона;  $\mu$  — модуль сдвига;  $b_{ed}^{(j)}$  — модуль краевой составляющей вектора Бюргера ДОН;  $\dot{\gamma}^{(j)}$  — скорость сдвига по  $j$ -й СС;  $\xi_{(i,m)}^{(s,k)}$  — мера разориентации  $s$ -й СС рассматриваемого  $i$ -го кристаллита, взаимодействующей с  $m$ -м кристаллитом через  $k$ -ю фасетку границы;  $\phi$  — параметр, который для кубических кристаллов имеет значение порядка 0,05 [27];  $\eta$  — безразмерный параметр, устанавливаемый при идентификации модели;  $S$  — площадь границы кристаллита;  $S_k$  — площадь  $k$ -й фасетки кристаллита.

### 3. Соотношение для скоростей сдвигов, обусловленных движением дислокаций

Доступные авторам этой работы экспериментальные данные указывают на различный характер зависимости скорости дислокаций  $v$  от приложенных касательных усилий  $\tau$ , поэтому попытка описать

все многообразие кривых  $v(\tau)$  на основе одного механизма не представляется возможной, однако можно отметить некоторые закономерности. Экспериментальная зависимость  $v(\tau)$  достаточно хорошо изображается в логарифмических координатах двумя прямыми вида [28]:

$$v = v_0 (\tau / \tau_0)^n, \quad (32)$$

где множитель  $\tau_0$  имеет размерность напряжений, параметр  $v_0$  — размерность скорости перемещений, а  $n$  — безразмерный параметр. Отметим, что приведение к безразмерному виду степенных выражений — общий прием, к которому прибегают для того, чтобы не изменять размерность параметров в зависимости от показателя степени. В более поздних работах [29, 30 и других] предлагается формула для скоростей дислокаций, учитывающая температуру деформации:

$$v = v_0 \left( \frac{\tau}{\tau_0} \right)^n \exp \left( - \frac{\Delta G}{k\theta} \right), \quad (33)$$

где  $\Delta G$  — энергия активации движения дислокации (свободная энергия Гиббса).

Отметим, что выше рассматривались одиночные дислокации, однако для дальнейших рассуждений необходимо перейти к величинам мезоуровня. Полагается, что плотность активных дислокаций  $k$ -й СС известна в каждый момент времени и равняется  $\rho^{(k)}$ , тогда скорость сдвига определяется согласно соотношению Орована:

$$\dot{\gamma}_s^{(k)} = b^{(k)} \rho^{(k)} v^{(k)}, \quad (34)$$

где  $b^{(k)}$  — модуль вектора Бюргерса. В дальнейшем будем полагать, что, если вид функции  $v(\tau)$  известен, то можно перейти от нее к зависимости  $\dot{\gamma}_s^{(k)}(\tau)$  с помощью уравнения Орована (34).

При движении дислокации преодолевают различные препятствия: точечные (примесные атомы), линейные (дислокации леса, барьеры Ломера–Коттрелла и другие) и объемные (выделения вторичных фаз и другие). Преодоление препятствий в этом режиме есть термоактивируемый процесс, поэтому для описания скорости сдвига за счет движения дислокаций можно воспользоваться соотношением вида:

$$\dot{\gamma}_s^{(k)} = \dot{\gamma}_0^{(k)} \left( \frac{\tau_s^{(k)}}{\tau_c^{(k)}} \right)^{1/m} \exp \left( - \frac{\Delta G}{k\theta} \right) H(\tau_s^{(k)} - \tau_c^{(k)}), \quad (35)$$

где  $\Delta G$  — энергия активации движения дислокаций;  $\tau_s^{(k)}$ ,  $\tau_c^{(k)}$  — сдвиговые и критические напряжения  $k$ -й СС;  $k$  — константа Больцмана;  $\theta$  — абсолютная температура.

#### 4. Алгоритм численной реализации предлагаемой модели

Далее приводится алгоритм численной реализации представленной выше двухуровневой модели, учитывающей эволюцию мезо- и микроструктуры. Вычисления делаются в два этапа: получение решения в скоростях и интегрирование системы обыкновенных дифференциальных уравнений [31, 32]. Интегрирование на втором этапе осуществляется с помощью явной схемы Эйлера, имеющей первый порядок точности. Для решения задачи используется пошаговая процедура, на каждом шаге которой устанавливается напряженно-деформированное состояние кристаллита, а также значения всех внутренних переменных модели.

Разностный аналог дифференциального уравнения первого порядка  $dy/dx = f(x, y)$  в момент времени  $t \in [t_i, t_{i+1}]$  при шаге  $h = t_{i+1} - t_i$ , согласно методу Эйлера, имеет следующий вид [33]:

$$y_{i+1} = y_i + h(f(t_i, y_i)). \quad (36)$$

Поскольку рассматриваемая модель основана на расширенной гипотезе Фойгта, то согласно ей принимается равенство градиентов скоростей перемещений на макро- ( $\hat{\nabla} \mathbf{V}$ ) и мезо- ( $\hat{\nabla} \mathbf{v}$ ) уровнях. Предполагается, что определены все компоненты  $\hat{\nabla} V_{ij}$  (или компоненты градиента деформаций  $F_{ij}$  как функции времени) в лабораторной системе координат (ЛСК) с декартовым ортогональным базисом  $\mathbf{k}_i$ . В некоторых частных

случаях (например при одноосном нагружении) известной является только часть компонент, тогда как остальные находятся из условия удовлетворения предписанному напряженному состоянию [34].

Обсудим процедуру интегрирования уравнений модели на некотором временном шаге  $t \in [t_i, t_{i+1}]$ . На начало шага  $t = (t_i)$  считаются установленными значения параметров отклика и всех внутренних переменных: на макроуровне — это напряжения макроуровня  $\Sigma(t_i)$ , абсолютная температура  $\Theta(t_i)$ , тензор деформации скорости  $\mathbf{D}$  и тензор вихря  $\mathbf{W}$ , остальные переменные макроуровня равняются осредненным величинам с мезоуровня; на мезоуровне — это тензор напряжений кристаллита  $\sigma(t_i)$ , абсолютная температура кристаллита  $\theta(t_i)$ , тензор деформации скорости  $\mathbf{d} = \mathbf{D}$  и тензор вихря  $\mathbf{w} = \mathbf{W}$  (расширенная гипотеза Фойгта), накопленные сдвиги по всем СС  $\gamma^{(k)}(t_i)$ , критические напряжения сдвига  $\tau_c^{(k)}(t_i)$ , ориентация кристаллита относительно ЛСК  $\mathbf{o}(t_i)$ , форма кристаллита (для простоты принимается шестигранной), средний размер кристаллита  $R$  (постоянный в процессе деформирования), направление нормалей фасеток границ  $\mathbf{q}^{(m)}(t_i)$ , тензор упругих свойств в рассматриваемом диапазоне температур (принимается постоянным в процессе деформирования и в терминах кристаллографической системы координат (КСК) записывается как  $\mathbf{n} = \mathbf{n}(t_i) = \mathbf{n}(t_{i+1})$ ), направление векторов Бюргерса  $\hat{\mathbf{b}}^{(k)}(t_i)$  и нормалей плоскостей скольжения  $\hat{\mathbf{n}}^{(k)}(t_i)$ . Делается предположение о том, что конфигурация области на всех уровнях в момент начала деформирования ( $t_i = 0$ ) является естественной — отсутствуют деформации и напряжения мезо- и макроуровня.

Итак, процедура интегрирования уравнений модели на временном шаге  $t \in [t_i, t_{i+1}]$  включает:

*Цикл по кристаллитам* (расчет для каждого кристаллита производится в базисе КСК). Этот цикл состоит из двух частей: 1-й и 2-й. Разделение на две части выполнено для реализации предлагаемой модели упрочнения кристаллита за счет барьеров, связанных с границами кристаллитов, где критические напряжения зависят как от скоростей неупругих сдвигов в текущем кристаллите, так и от скоростей неупругих сдвигов в соседних зернах.

*1-я часть.* Здесь вычисляются характеристики текущего кристаллита (индекс кристаллита далее опущен): скорости сдвигов, скорости критических напряжений, сдвиги на конец рассматриваемого шага на первой итерации по времени.

1а. Определяются сдвиговые напряжения (11), скорости сдвигов (27), (35), сдвиги на конец временного шага  $(\gamma^{(k)}(t_{i+1}) = \gamma^{(k)}(t_i) + \Delta t \dot{\gamma}^{(k)}(t_i))$ , где  $k = 1, \dots, K$ , и пластическая составляющая тензора деформации скорости (6).

1б. Находится скорость изменения температуры (12), температура на конец шага  $\theta(t_{i+1}) = \theta(t_i) + \Delta t \dot{\theta}(t_i)$  и температурная составляющая тензора деформации скорости (7).

1с. Рассчитывается тензор спина решетки согласно модели Тейлора:

$$\boldsymbol{\omega}(t_i) = \frac{1}{2}(\hat{\nabla} \mathbf{v}^T - \hat{\nabla} \mathbf{v}) - \sum_{k=1}^K \frac{1}{2} \dot{\gamma}^{(k)}(t_i) (\mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)}(t_i) - \mathbf{n}^{(k)} \mathbf{b}^{(k)}(t_i)).$$

1д. По тензору спина устанавливается соответствующий вектор скорости поворота:

$$\dot{\boldsymbol{\phi}}(t_i) = \frac{1}{2} \boldsymbol{\epsilon} : \boldsymbol{\omega}(t_i), \quad \boldsymbol{\epsilon} \text{ — тензор Леви-Чивиты 3-го ранга.}$$

1е. Отыскивается ориентационный тензор (совмещающий кристаллографическую и лабораторную системы координат) путем последовательного определения мгновенной оси поворота

$$\mathbf{e}(t_i) = \dot{\boldsymbol{\phi}}(t_i) / |\dot{\boldsymbol{\phi}}(t_i)|,$$

– приращения угла поворота

$$\Delta \varphi(t_i) = \Delta t |\dot{\boldsymbol{\phi}}(t_i)|,$$

– приращения тензора поворота за шаг

$$\Delta \mathbf{r}(t_i) = (\cos(\Delta \varphi(t_i)) + 1) \mathbf{e}(t_i) \mathbf{e}(t_i) + \cos(\Delta \varphi(t_i)) \mathbf{E} + \sin(\Delta \varphi(t_i)) \mathbf{e}(t_i) \times \mathbf{E},$$

– ориентационного тензора на конец шага

$$\mathbf{o}(t_{i+1}) = \Delta \mathbf{r}(t_i) \cdot \mathbf{o}(t_i).$$

1f. Вычисляются значения  $\hat{\mathbf{b}}^{(k)}(t_{i+1})$ ,  $\hat{\mathbf{n}}^{(k)}(t_{i+1})$ ,  $\mathbf{m}^{(k)}(t_{i+1})$ ,  $\mathbf{p}^{(k)}(t_{i+1})$  (по  $\mathbf{o}(t_{i+1})$  и известным компонентам в кристаллографической системе координат с использованием вышеприведенных соотношений).

2-я часть цикла по текущему кристаллиту реализует вычисления скоростей и значений остальных переменных мезоуровня на конец шага в зависимости от найденных в 1-й части скоростей неупругих сдвигов в текущем кристаллите.

2a. Находятся скорости критических напряжений и критические напряжения на конец шага:

$$\begin{aligned} \dot{\tau}_{c(1)}^{(k)}(t_i) &= f\left(\gamma^{(k)}(t_i), \dot{\gamma}_{(1)}^{(k)}(t_i)\right) \quad (i=1, \dots, K), \\ \tau_{c(1)}^{(k)}(t_{i+1}) &= \tau_c^{(k)}(t_i) + \Delta t \dot{\tau}_c^{(k)}(t_i), \quad (i=1, \dots, K). \end{aligned}$$

2.1a. Для каждой СС по (28) определяются скорости изменения критических напряжений сдвига  $\dot{\tau}_{st}^{(k)}(t_i)$ , связанные с взаимодействием краевых дислокаций.

2.1b. Для каждой СС по (29) устанавливаются составляющие скоростей критических напряжений сдвига  $\dot{\tau}_{sp}^{(k)}(t_i)$ , обусловленные возникновением барьеров типа Ломера–Коттрелла.

2.1с. Для каждой СС вычисляются скорости изменения критического напряжения сдвига  $\dot{\tau}_d^{(k)}$ , связанного с взаимодействием краевых решеточных дислокаций с фасетками границ соседних кристаллитов.

*Начало цикла по фасеткам границы текущего кристаллита*

Рассчитываются скорости изменения нормали  $m$ -й фасетки границы и ее ориентации на конец шага:

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{q}}^{(m)}(t_i) &= \left(\mathbf{q}^{(m)}(t_i) \cdot \mathbf{D} \cdot \mathbf{q}^{(m)}(t_i)\right) \mathbf{q}^{(m)}(t_i) - \hat{\nabla} \mathbf{v} \cdot \mathbf{q}^{(m)}(t_i), \\ \mathbf{q}^{(m)}(t_{i+1}) &= \mathbf{q}^{(m)}(t_i) + \Delta t \dot{\mathbf{q}}^{(m)}(t_i). \end{aligned}$$

*Начало цикла по СС текущего кристаллита*

Отбрасываются все СС текущего  $j$ -го кристаллита, которые не выходят на текущую  $m$ -ю фасетку кристаллита, то есть рассматриваются СС, удовлетворяющие условию:  $\mathbf{b}^{(j)}(t_{i+1}) \cdot \mathbf{q}^{(m)}(t_{i+1}) > 0$ .

Исключаются все СС соседнего  $l$ -го кристаллита, сдвиг по которым противоположен текущему, берутся СС, удовлетворяющие условию:  $\mathbf{b}^{(j)}(t_{i+1}) \cdot \mathbf{b}^{(l)}(t_{i+1}) > 0$ .

Определяются базисные векторы  $\mathbf{l}^{(m)}(t_{i+1})$  и  $\mathbf{b}^{(m)}(t_{i+1})$ , связанные с  $m$ -й фасеткой границы и текущей СС:  $\mathbf{l}^{(m)}(t_{i+1}) = \mathbf{q}^{(m)}(t_{i+1}) \times \hat{\mathbf{n}}^{(j)}(t_{i+1})$ ,  $\mathbf{b}^{(m)}(t_{i+1}) = \mathbf{q}^{(m)}(t_{i+1}) \times \mathbf{l}^{(m)}(t_{i+1})$ .

В базисе  $(\mathbf{b}^{(m)}, \mathbf{q}^{(m)}, \mathbf{l}^{(m)})$  находятся компоненты пластических градиентов скоростей перемещений  $[L_{(j)}^{in}]_{ij}(t_i)$  рассматриваемой  $j$ -й СС текущего кристаллита и пластических градиентов скоростей перемещений  $[L_{(l)}^{in}]_{ij}(t_i)$  соседнего кристаллита, удовлетворяющие приведенным выше условиям.

На основе результатов предыдущего шага вычисляется мера взаимной разориентации СС:

$$\xi_{(i,m)}^{(j,k)}(t_i) = \min_l \left\{ \xi_{(j,l)}, l = \overline{1, K} \right\} = \alpha^{(j)} \min_l \left\{ \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \left( [L_{(l)}^{in} - L_{(j)}^{in}]_{ij}(t_i) \right)^2 \right\}.$$

Определяется ДОН, и в текущем кристаллите выбираются такие  $s$ -е СС, в которых упругие поля напряжений указанной ДОН являются барьерными, то есть затрудняющими скольжение подвижных дислокаций.

*Конец цикла по СС текущего кристаллита*

*Конец цикла по фасеткам границы текущего кристаллита*

2.1d. По формуле (30) определяются скорости критических напряжений сдвига за счет границы кристаллита.

2.1e. По (25), (26) для каждой СС устанавливаются скорости критического напряжения сдвига  $\dot{\tau}_n^{(k)}(t_i)$ ,  $\dot{\tau}_{rc}^{(k)}(t_i)$ , связанные с динамическим возвратом и рекристаллизацией.

2.1f. Рассчитываются скорости критических напряжений сдвига:

$$\dot{\tau}_c^{(k)}(t_i) = \dot{\tau}_{cs}^{(k)}(t_i) + \dot{\tau}_d^{(k)}(t_i) + \dot{\tau}_{sp}^{(k)}(t_i) + \dot{\tau}_n^{(k)} + \dot{\tau}_{rc}^{(k)}.$$

2b. Находятся скорости напряжений и напряжения на конец шага:

$$\begin{aligned} \dot{\sigma}(t_i) &= \omega(t_i) \cdot \sigma(t_i) - \sigma(t_i) \cdot \omega(t_i) + c(t_i) : (\mathbf{d} - \mathbf{d}^{in}(t_i) - \mathbf{d}^{th}(t_i)), \\ \sigma(t_{i+1}) &= \sigma(t_i) + \Delta t \dot{\sigma}(t_i). \end{aligned}$$

3. Расчеты на макроуровне:

3a. Вычисляются значения внутренних переменных макроуровня: тензора спина, температуры, тензора эффективных упругих свойств, его флуктуаций, флуктуаций пластической и температурной составляющих деформации скорости, спина и напряжений:

$$\begin{aligned} \Omega(t_i) &= \langle \omega(t_i) \rangle, \quad \Theta = \langle \theta \rangle, \quad \mathbf{\Pi}(t_{i+1}) = \langle \mathbf{n}(t_{i+1}) \rangle, \\ \mathbf{n}'(t_{i+1}) &= \mathbf{n}(t_{i+1}) - \langle \mathbf{n}(t_{i+1}) \rangle, \quad \mathbf{d}^{in'}(t_i) = \mathbf{d}^{in}(t_i) - \langle \mathbf{d}^{in}(t_i) \rangle, \\ \mathbf{d}^{th'}(t_i) &= \mathbf{d}^{th}(t_i) - \langle \mathbf{d}^{th}(t_i) \rangle, \quad \omega'(t_i) = \omega(t_i) - \langle \omega(t_i) \rangle, \\ \sigma'(t_{i+1}) &= \sigma(t_{i+1}) - \langle \sigma(t_{i+1}) \rangle, \end{aligned}$$

неупругая и температурная составляющие тензора деформации скорости

$$\begin{aligned} \mathbf{D}^{in}(t_i) &= \langle \mathbf{d}^{in}(t_i) \rangle + (\mathbf{\Pi}(t_{i+1}))^{-1} : \langle \mathbf{n}'(t_{i+1}) : \mathbf{d}^{in'}(t_i) \rangle - (\mathbf{\Pi}(t_{i+1}))^{-1} : \left( \langle \omega(t_i)' \cdot \sigma'(t_{i+1}) \rangle - \langle \sigma'(t_{i+1}) \cdot \omega(t_i)' \rangle \right), \\ \mathbf{D}^{th}(t_i) &= \langle \mathbf{d}^{th}(t_i) \rangle - (\mathbf{\Pi}(t_{i+1}))^{-1} : \langle \mathbf{n}'(t_{i+1}) : \mathbf{d}^{th'}(t_i) \rangle. \end{aligned}$$

3b. Устанавливаются скорости напряжений и напряжения после второй итерации:

$$\begin{aligned} \dot{\Sigma}(t_i) &= -\Omega^T(t_i) \cdot \Sigma(t_{i+1}) - \Sigma(t_{i+1}) \cdot \Omega(t_i) + \mathbf{\Pi}(t_{i+1}) : (\mathbf{D} - \mathbf{D}^{in}(t_i) - \mathbf{D}^{th}(t_i)), \\ \Sigma(t_{i+1}) &= \Sigma(t_i) + \Delta t \dot{\Sigma}(t_i). \end{aligned}$$

Следует отметить, что предложенный алгоритм может быть использован для произвольного вида кинематического и смешанного нагружения, в том числе одноосного деформирования [32]. Существует возможность распараллеливания программного кода, написанного на каком-либо современном языке программирования (на Fortran, C++ и других), однако на практике его воплощение сильно ограничено в силу учета взаимодействия между соседними кристаллитами.

## 5. Результаты моделирования

Ниже представлены некоторые результаты моделирования в условиях одноосного нагружения ПО (включающего 343 кристаллита) двухфазного поликристаллического материала, состоящего из аустенитной и ферритной фаз, при скорости деформирования  $10^{-3} \text{ c}^{-1}$ . Параметры материала каждой из фаз взяты из работ [9, 10, 35–37], введенные в модель дополнительные параметры определялись на основе предварительных расчетов и анализа данных о микроструктуре. Форма каждого кристаллита в отчетной конфигурации полагалась шестигранной, при этом грани считались полностью сопряженными с соседними зернами. Тип фазы (аустенитной или ферритной) устанавливался случайным образом по равномерному закону; мезоструктура поликристалла генерировалась один раз и в последующих численных экспериментах воспроизводилась идентичным образом; объемная доля аустенита составляла 46%, соответственно феррита — 54%.

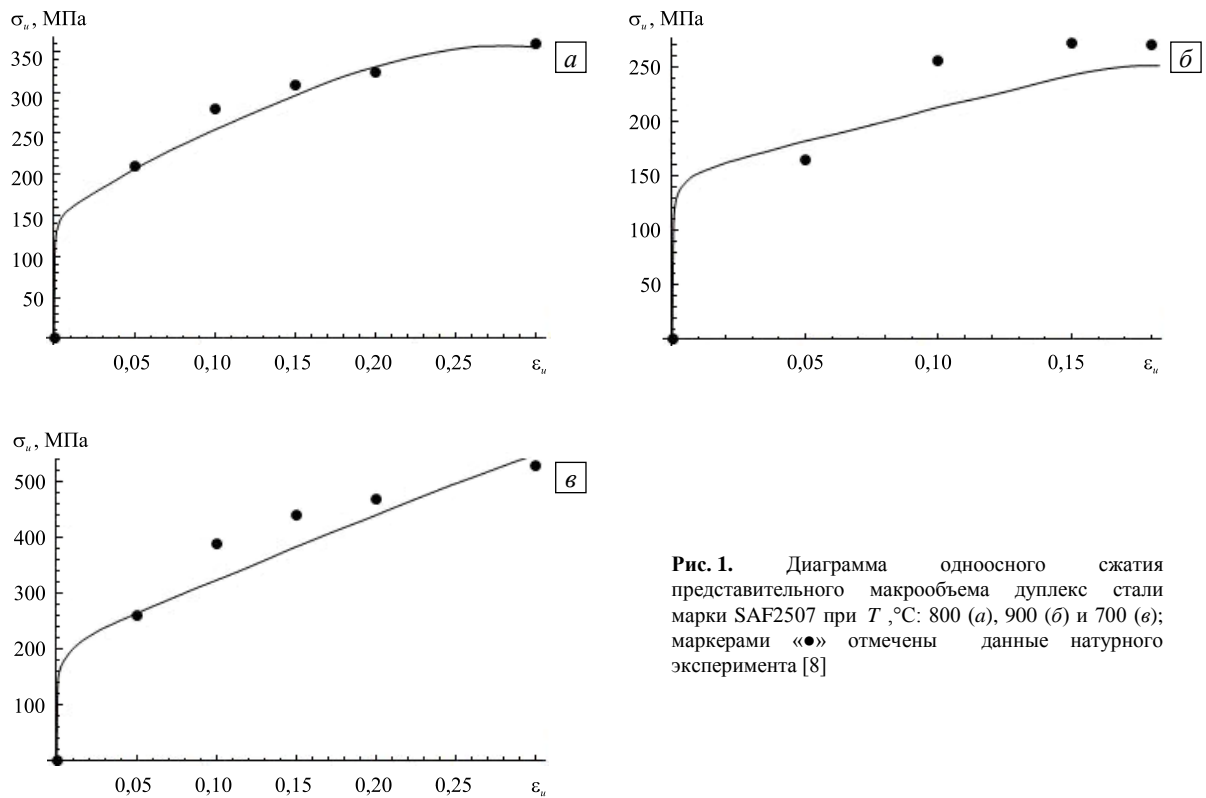
Параметры фаз были следующими:

– аустенитная фаза (ГЦК–решетка) —  $\pi_1^{06} = \pi_{1111} = 198 \cdot 10^9$  Па,  $\pi_2^{06} = \pi_{1122} = 125 \cdot 10^9$  Па,  $\pi_3^{06} = \pi_{1212} = 122 \cdot 10^9$  Па (компоненты тензора свойств определены в кристаллографической системе координат, остальные компоненты находились из условий симметрии),  $\tau_{c0} = 38 \cdot 10^6$  Па,  $\dot{\gamma}_0 = 1 \cdot 10^{-4} \text{ с}^{-1}$ ,  $m = 10^{-2}$ ,  $n = 30$ ,  $\eta = 0,5$ ,  $\psi = 4,49$ ,  $\delta = 4,4$ ,  $R = 3 \cdot 10^{-6}$  м,  $S_k/S = 1/6$ ,  $h_i^{(k)} = 2,53$ ,  $\delta_{\text{ЭДУ}} = 2 \cdot 10^{-2}$  Дж/м<sup>2</sup>,  $Q = 454$  Дж/моль,  $Q_d = 180 \cdot 10^3$  Дж/моль,  $\alpha = 16 \cdot 10^{-6}$ ,  $c_v = 520$  Дж/К,  $\rho = 7860$  кг/м<sup>3</sup>,  $\xi_1 = 40 \cdot 10^6$  Па,  $\gamma_0^b = 7 \cdot 10^{-4}$ ,  $\delta_{\text{ЭДУ}}^* = 8 \cdot 10^{-2}$  Дж/м<sup>2</sup>,  $f_0^{(k)} = 60 \cdot 10^6$  Па;

– ферритная фаза (ОЦК–решетка) —  $\pi_1 = 231 \cdot 10^9$  Па,  $\pi_2 = 134 \cdot 10^9$  Па,  $\pi_3 = 116 \cdot 10^9$  Па,  $\tau_{c0} = 34 \cdot 10^6$  Па,  $\dot{\gamma}_0 = 1 \cdot 10^{-4} \text{ с}^{-1}$ ,  $m = 10^{-2}$ ,  $n = 30$ ,  $\eta = 0,8$ ,  $\psi = 4,59$ ,  $\delta = 4,5$ ,  $R = 5 \cdot 10^{-6}$  м,  $S_k/S = 1/6$ ,  $h_i^{(k)} = 0,33$ ,  $\delta_{\text{ЭДУ}} = 5 \cdot 10^{-2}$  Дж/м<sup>2</sup>,  $Q = 310$  Дж/моль,  $Q_d = 180 \cdot 10^3$  Дж/моль,  $\alpha = 12,5 \cdot 10^{-6}$ ,  $c_v = 450$  Дж/К,  $\rho = 7800$  кг/м<sup>3</sup>.

Температура деформирования составляла 700, 800 или 900°C. Модель идентифицировалась при температуре 800°C.

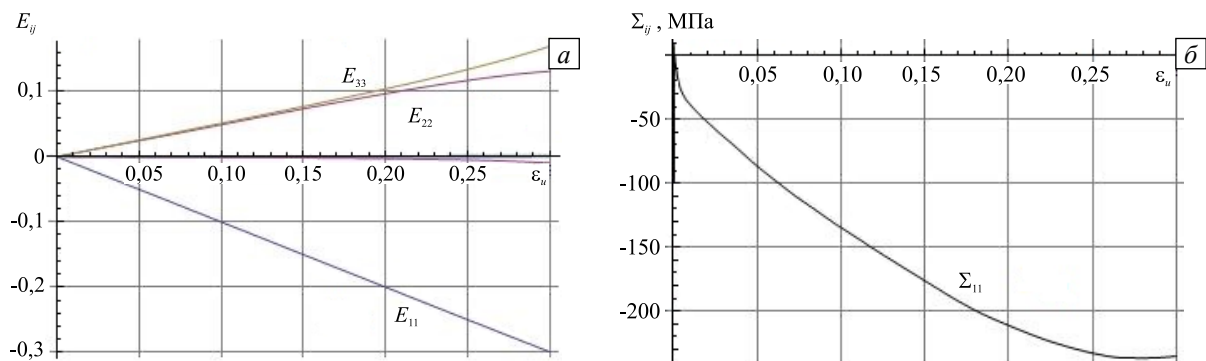
На рисунке 1а изображена диаграмма одноосного сжатия вдоль оси  $Ox^1$  фиксированной лабораторной системы координат ПО дуплекс стали марки SAF 2507 при температуре 800°C; маркерами «●» отмечены экспериментальные данные из работы [8]. Следует отметить, что параметры материала фиксировались для всех трех экспериментов, а начальные критические напряжения  $\sigma_c$  полагались функциями температуры, которые находились на основе экспериментальных данных [8]; начальные критические напряжения указанного материала при температуре 800°C приведены выше.



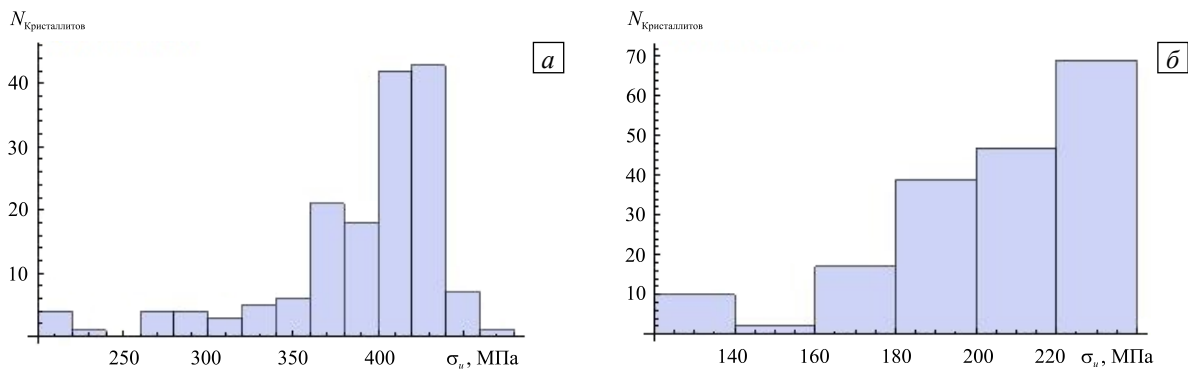
**Рис. 1.** Диаграмма одноосного сжатия представительного макрообъема дуплекс стали марки SAF2507 при  $T, ^\circ\text{C}$ : 800 (а), 900 (б) и 700 (в); маркерами «●» отмечены данные натурального эксперимента [8]

На рисунке 2 в ЛСК показаны зависимости от интенсивности накопленных деформаций  $\epsilon_u$  компонент тензоров деформаций и напряжений (компоненты, отличные от  $\Sigma_{11}$ , равны нулю, что согласуется с предписанным видом нагружения). Имеет место некоторое различие компонент тензора накопленных деформаций  $E_{22}$  и  $E_{33}$ , что обусловлено наведением определенной анизотропии в ориентациях кристаллитов; указанная анизотропия, вероятно, возникает вследствие неточностей используемой в работе модели ротации Тейлора, анализ которой выходит за рамки настоящей статьи.

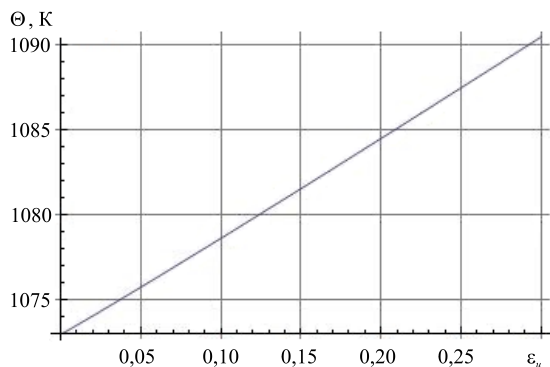
На рисунке 3 продемонстрированы гистограммы распределения интенсивности напряжений для аустенитной (среднее значение — 390 МПа, среднее отклонение — 22 МПа) и ферритной (среднее значение — 203 МПа, среднее отклонение — 19 МПа) фаз в момент окончания процесса одноосного сжатия ПО дуплекс стали марки SAF2507 при начальной температуре 800°C.



**Рис. 2.** Зависимости компонент тензора деформации (а) и компонент тензора напряжений (б) в ЛСК от интенсивности деформаций при одноосном сжатии образцов из дуплекс стали марки SAF2507 при начальной температуре 800°C



**Рис. 3.** Гистограмма распределения интенсивности напряжений в аустенитной (а) и ферритной (б) фазах в момент окончания одноосного сжатия дуплекс стали SAF2507 при начальной температуре 800°C

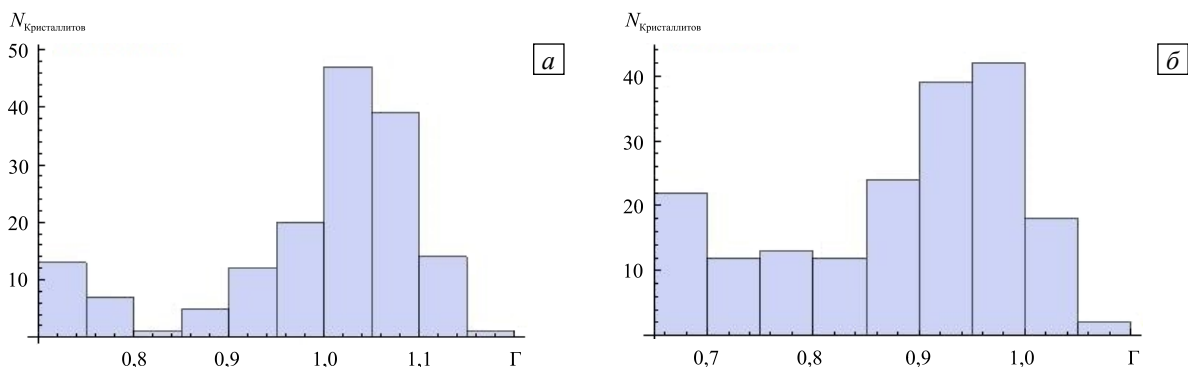


**Рис. 4.** Эволюция средней температуры поликристалла в процессе одноосного сжатия представительного объема дуплекс стали SAF2507

Рисунок 4 содержит эволюцию средней температуры ПО поликристалла в процессе одноосного сжатия.

На рисунке 5 показаны гистограммы распределения суммарного накопленного сдвига (суммы накопленных сдвигов по всем системам скольжения каждого кристаллита) для кристаллитов аустенитной (среднее значение — 0,99, среднее отклонение — 0,05) и ферритной (среднее значение — 0,88, среднее отклонение — 0,07) фаз.

На рисунке 6 приведена эволюция среднего числа активных СС в аустенитной и ферритной фазах.



**Рис. 5.** Гистограмма распределения суммарного накопленного сдвига для кристаллитов аустенитной (а) и ферритной (б) фаз в момент окончания одноосного сжатия дуплекс стали SAF2507 при начальной температуре 800°C



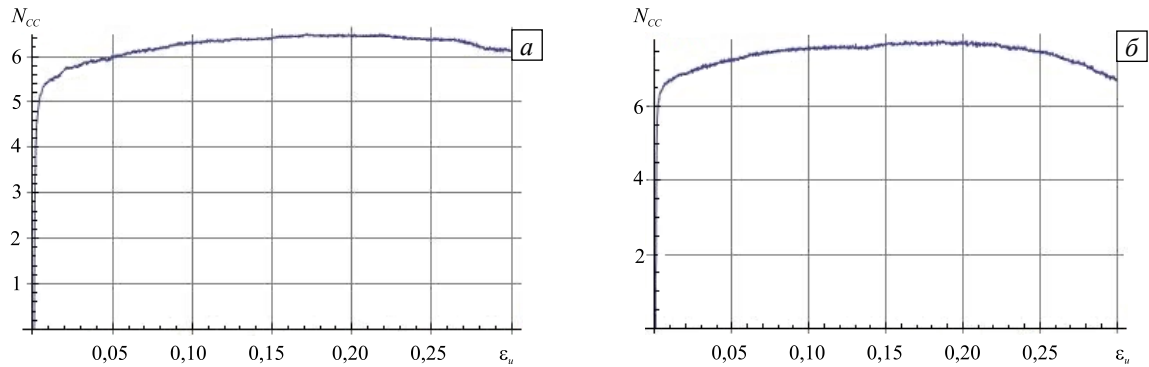


Рис. 6. Эволюция среднего числа активных систем скольжения в аустенитной (а) и ферритной (б) фазах

Рассматриваемая модель позволяет исследовать эволюцию ориентации кристаллитов, строить полюсные фигуры для любой стадии процесса. Однако для анализируемых степеней деформации сколь-нибудь заметные изменения ориентации кристаллитов отсутствуют, в силу этого соответствующие результаты не приводятся.

## 6. Заключение

В работе рассмотрена модификация физической двухуровневой упруговязкопластической модели, описывающей конститутивное поведение двухфазного материала — дуплекс стали. В модели учтены основные механизмы упрочнения и разупрочнения каждой фазы, в том числе изменение критических напряжений СС за счет рекристаллизации в аустенитной фазе и динамического возврата в ферритной фазе и влияние на них температуры. Результаты, полученные по модифицированной модели, согласуются с данными натуральных экспериментов, свидетельствуя о корректном качественном описании неупругого поведения материала на макроуровне. Наблюдающееся различие компонент тензора накопленных деформаций  $E_{22}$  и  $E_{33}$  обусловлено, по всей вероятности, наведенной анизотропией в ориентациях кристаллитов, которая возникает вследствие используемой в работе модели ротации Тейлора, анализ которой выходит за рамки настоящей статьи. Расчетные данные свидетельствуют о возможности применения предлагаемой модели к исследованию реальных технологических процессов термомеханической обработки многофазных сплавов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ (базовая часть государственного задания ПНИПУ, № гос. регистр. 01201460535), РФФИ (проекты №12-08-01052-а, №13-01-96006-р\_урал\_а, 14-01-00069-а, 14-01-96008-р\_урал\_а).

## Литература

1. Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций. – М.: Атомиздат, 1972. – 600 с.
2. Хоникомб Р. Пластическая деформация металлов. – М.: Мир, 1972. – 408 с.
3. Новиков И.И. Дефекты кристаллического строения металлов. – М.: Металлургия, 1975. – 208 с.
4. Трусов П.В., Волегов П.С. Физические теории пластичности: теория и приложения к описанию неупругого деформирования материалов. Ч. 1: Жесткопластические и упругопластические модели // Вестник ПНИПУ. Механика. – 2011. – № 1. – С. 5-45.
5. Трусов П.В., Волегов П.С. Физические теории пластичности: теория и приложения к описанию неупругого деформирования материалов. Ч. 2: Вязкопластические и упруговязкопластические модели // Вестник ПНИПУ. Механика. – 2011. – № 2. – С. 101-131.
6. Трусов П.В., Волегов П.С. Физические теории пластичности: теория и приложения к описанию неупругого деформирования материалов. Ч. 3: Теории упрочнения, градиентные теории // Вестник ПНИПУ. Механика. – 2011. – № 3. – С. 146-197.
7. Bartali A.El., Evrard P., Aubin V., Herenú S., Alvarez-Armas I., Armas A.F., Degallaix-Moreuil S. Strain heterogeneities between phases in a duplex stainless steel. Comparison between measures and simulation // Procedia Engineering. – 2010. – Vol. 2, no. 1. – P. 2229-2237. DOI
8. Cabrera J.M., Mateo A., Llanes L., Prado J.M., Anglada M. Hot deformation of duplex stainless steels // J. Mater. Process. Tech. – 2003. – Vol. 143-144. – P. 321-325. DOI
9. Dakhlaoui R., Braham C., Baczański A. Mechanical properties of phases in austeno-ferritic duplex stainless steel – Surface stresses studied by X-ray diffraction // Mater. Sci. Eng. A-Struct. – 2007. – Vol. 444, no. 1-2. – P. 6-17. DOI
10. Faccoli M., Roberti R. Study of hot deformation behaviour of 2205 duplex stainless steel through hot tension tests // J. Mater. Sci. – 2013. – Vol. 48, no. 15. – P. 5196-5203. DOI
11. Farnousha H., Momenia A., Dehghanian K., Mohandesia J.A., Keshmirib H. Hot deformation characteristics of 2205 duplex stainless steel based on the behavior of constituent phases // Mater. Design. – 2010. – Vol. 31, no. 1. – P. 220-226.

12. Evangelista E., Mengucci P., Bowles J., McQueen H.J. Grain and subgrain structures developed by hot working in as-cast 434 stainless steel // *High Temp. Mater. Process.* – 1993. – Vol. 12. – P. 57-66.
13. Cizek P., Wynne B.P. A mechanism of ferrite softening in a duplex stainless steel deformed in hot torsion // *Mater. Sci. Eng. A-Struct.* – 1997. – Vol. 230, no. 1-2. – P. 88-94. DOI
14. Iza-Mendia A., Piñol-Juez A., Urcola J.J., Gutiérrez I. Microstructural and mechanical behavior of a duplex stainless steel under hot working conditions // *Metall. Mater. Trans. A.* – 1998. – Vol. 29, no. 12. – P. 2975-2986. DOI
15. Бокштейн С.З. Структура и свойства металлических сплавов. – М.: Металлургия, 1971. – 496 с.
16. Трусов П.В., Ашихмин В.Н., Швейкин А.И. Двухуровневая модель упругопластического деформирования поликристаллических материалов // *Механика композиционных материалов и конструкций.* – 2009. – Т. 15. № 3. – С. 327-344.
17. 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.
18. Трусов П.В., Швейкин А.И. Теория пластичности. – Пермь: Изд-во ПНИПУ, 2011. – 419 с.
19. Трусов П.В., Волегов П.С. Определяющие соотношения с внутренними переменными и их применение для описания упрочнения в монокристаллах // *Физ. мезомех.* – 2009. – Т. 12, № 5. – С. 65-72.
20. Кондратьев Н.С., Трусов П.В. Физическая модель неупругого деформирования двухфазных поликристаллов // *Вестник Тамбовского университета.* – 2013. – Т. 18, № 4 – С. 1873-1874.
21. Лубенец С.В. Динамический возврат и кинетика релаксации напряжений в кристаллах при низких и высоких гомологических температурах // *ФТТ.* – 2002. – Т. 44, № 1. – С. 72-77.
22. Kuhlmann D., Masing G., Raffelsieper J. Zur Theorie der Erholung // *Zeitschrift für Metallkunde.* – 1949. – Vol. 40. – P. 241-246.
23. Фридель Ж. Дислокации. – М.: Мир. – 1967. – 644 с.
24. Трусов П.В., Волегов П.С., Яниц А.Ю. Двухуровневые модели поликристаллов: приложение к анализу сложного нагружения // *Физ. мезомех.* – 2013. – Т. 16, № 6. – С. 43-50.
25. Кондратьев Н.С., Трусов П.В. О мере разориентации систем скольжения соседних кристаллитов в поликристаллическом агрегате // *Вестник ПНИПУ. Механика.* – 2012. – № 2. – С. 112-127.
26. Кондратьев Н.С., Трусов П.В. Описание упрочнения систем дислокационного скольжения за счет границ кристаллитов в поликристаллическом агрегате // *Вестник ПНИПУ. Механика.* – 2012. – № 3. – С. 78-97.
27. Кондратьев Н.С., Трусов П.В. Моделирование неупругого деформирования поликристаллических материалов с учетом упрочнения за счет границ кристаллитов // *Вестник ПГУ. Серия: Физика.* – 2012. – № 4 (22). – С. 92-100.
28. Орлов А.Н., Перевезенцев В.Н., Рыбин В.В. Границы зерен в металлах. – М.: Металлургия. – 1980. – 156 с.
29. Куксин А.Ю., Янилкин А.В. Атомистическое моделирование движения дислокаций в металлах в условиях фононного трения // *ФТТ.* – 2013. – Т. 55, № 5. – С. 931-939.
30. Kocks U.F., Argon A.S., Ashby M.F. Thermodynamics and kinetics of slip / *Progress in materials science.* – Pergamon Press, 1975. – Vol. 19. – 291 p.
31. Нечаева Е.С., Трусов П.В. Конститутивная модель частично кристаллического полимерного материала. Алгоритм реализации модели мезоуровня // *Вычисл. мех. сплош. сред.* – 2011. – Т. 4, № 1. – С. 74-89. DOI
32. Нечаева Е.С., Трусов П.В. Конститутивная модель частично кристаллического полимерного материала. Алгоритм реализации для представительного объема макроуровня // *Вычисл. мех. сплош. сред.* – 2011. – Т. 4, № 2. – С. 82-95. DOI
33. Самарский А.А., Гулин А.В. Численные методы математической физики. – М.: Научный мир, 2000. – 315 с.
34. Trusov P.V., Volegov P.S., Shveykin A.I. Constitutive elasto-viscoplastic model of FCC-crystals: Theory and application algorithms. – Saarbrücken: LAP LAMBERT Academic Publ., 2011. – 147 p.
35. Charles J., Vincent B. Duplex stainless steels for chemical tankers // *Duplex Stainless Steels'97 Proceedings, 5th World conference, Maastricht, Netherlands, 21-23 October 1997.* – Vol. 2. – P. 727-736.
36. Dobrzański L.A., Brytan Z., Actis Grande M., Rosso M. Properties of duplex stainless steels made by powder, [http://www.archivesmse.org/vol28\\_4/2844.pdf](http://www.archivesmse.org/vol28_4/2844.pdf) (дата обращения: 03.06.2014).
37. Herrera C., Ponge D., Raabe D. Characterization of the microstructure, crystallographic texture and segregation of an as-cast duplex stainless steel slab // *Steel Research International.* – 2008. – Vol. 79, no. 6. – P. 482-488.

## References

1. Hirth J.P., Lothe J. *Theory of dislocations.* NY: McGraw-Hill, 1968.
2. Honeycomb P. *The plastic deformation of metals.* London: Edward Arnold, 1968.
3. Novikov I.I. *Defects of crystalline structure of metals.* Moscow: Metallurgiya, 1975. 208 p.
4. Trusov P.V., Volegov P.S. Crystal plasticity theories and their applications to the description of inelastic deformations of materials. Part 1: Rigid-plastic and elastoplastic theories. *PNRPU Mechanics Bulletin*, 2011, no. 1, pp. 5-45.
5. Trusov P.V., Volegov P.S. Crystal plasticity theories and their applications to the description of inelastic deformations of materials. Part 2: Viscoplastic and elastoviscoplastic theories. *PNRPU Mechanics Bulletin*, 2011, no. 2, pp. 101-131.
6. Trusov P.V., Volegov P.S. Crystal plasticity theories and their applications to the description of inelastic deformations of materials. Part 3: Hardening theories, gradient theories. *PNRPU Mechanics Bulletin*, 2011, no. 3, pp. 146-197.
7. Bartali A.El., Evrard P., Aubin V., Herenú S., Alvarez-Armas I., Armas A.F., Degallaix-Moreuil S. Strain heterogeneities between phases in a duplex stainless steel. Comparison between measures and simulation. *Procedia Engineering*, 2010, vol. 2, no. 1, pp. 2229-2237. DOI
8. Cabrera J.M., Mateo A., Llanes L., Prado J.M., Anglada M. Hot deformation of duplex stainless steels. *J. Mater. Process. Tech.*, 2003, vol. 143-144, pp. 321-325. DOI
9. Dakhlaoui R., Braham C., Baczmanski A. Mechanical properties of phases in austeno-ferritic duplex stainless steel – Surface stresses studied by X-ray diffraction. *Mater. Sci. Eng. A-Struct.*, 2007, vol. 444, no. 1-2, pp. 6-17. DOI
10. Faccoli M., Roberti R. Study of hot deformation behaviour of 2205 duplex stainless steel through hot tension tests. *J. Mater. Sci.*, 2013, vol. 48, no. 15, pp. 5196-5203. DOI

11. Farnousha H., Momenia A., Dehghania K., Mohandesia J.A., Keshmirib H. Hot deformation characteristics of 2205 duplex stainless steel based on the behavior of constituent phases. *Mater. Design*, 2010, vol. 31, no. 1, pp. 220-226.
12. Evangelista E., Mengucci P., Bowles J., McQueen H.J. Grain and subgrain structures developed by hot working in as-cast 434 stainless steel. *High Temp. Mater. Process*, 1993, vol. 12, pp. 57-66.
13. Cizek P., Wynne B.P. A mechanism of ferrite softening in a duplex stainless steel deformed in hot torsion. *Mater. Sci. Eng. A-Struct.*, 1997, vol. 230, no. 1-2, pp. 88-94. DOI
14. Iza-Mendia A., Piñol-Juez A., Urcola J.J., Gutiérrez I. Microstructural and mechanical behavior of a duplex stainless steel under hot working conditions. *Metall. Mater. Trans. A.*, 1998, vol. 29, no. 12, pp. 2975-2986. DOI
15. Bokshstein S.Z. Stroenie i svoistva metallicheskih splavov [Structure and properties of metallic alloys]. Moscow: Metallurgiya, 1971. 496 p.
16. Trusov P.V., Ashikhmin V.N., Shveykin A.I. Two-level model for polycrystalline materials elastoplastic deformation. *Mekhanika kompozitsionnykh materialov i konstruksii – Journal on Composite Mechanics and Design*, 2009, vol. 15, no. 3, pp. 327-344.
17. Trusov P.V., Shveikin 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. 1, pp. 33-56.
18. Trusov P.V., Shveikin A.I. *Teoriya plastichnosti* [Theory of plasticity]. Perm: Perm National Research Polytechnic University, 2011. – 419 p.
19. Trusov P.V., Volegov P.S. Internal variable constitutive models and their application to description of hardening in single crystals. *Phys. Mesomech.*, 2011, vol. 12, no. 5, pp. 65-72.
20. Kondratyev N.S., Trusov P.V. Physical model of inelastic deformation of two-phase polycrystals. *Tambov State University Bulletin. Series: Natural and Engineering Sciences*, 2013, vol. 18, no. 4, pp. 1873-1874.
21. Lubenets S.V. Dinamicheskii vozvrat i kinetika relaksatsii napryazhenii v kristallakh pri nizkikh i vysokikh gomologicheskikh temperaturakh [Dynamic recovery and stress relaxation kinetics in crystals at low and high homologous temperatures]. *Fizika tverdogo tela – Solid Physics*, 2002, vol. 44, no. 1, pp. 72-77.
22. Kuhlmann D., Masing G., Raffelsieper J. Zur Theorie der Erholung [To the theory of relaxation]. *Zeitschrift für Metallkunde – Journal of Metallurgy*, 1949, vol. 40, pp. 241-246.
23. Friedel J. *Dislocations*. Pergamon Press, 1964.
24. Trusov P.V., Volegov P.S., Yanz A.Yu. Two-scale models of polycrystals: Analysis of complex loading. *Phys. Mesomech.*, 2013, vol. 16, no. 6, pp. 43-50.
25. Kondratev N.S., Trusov P.V. Disorientation measure of neighboring crystallites slip systems in a polycrystalline aggregate. *PNRPU Mechanics Bulletin*, 2012, no. 2, pp. 112-127.
26. Kondratev N.S., Trusov P.V. Description of hardening slip systems due to boundaries of the crystallines in a polycrystalline aggregate. *PNRPU Mechanics Bulletin*, 2012, no. 3, pp. 78-97.
27. Kondratev N.S., Trusov P.V. Modeling of inelastic deformation of crystalline materials accounting hardening slip systems by the boundaries of the crystallines. *Bulletin of Perm State University. Series: Physics*, 2012, no. 4 (22), pp. 92-100.
28. Orlov A.N., Perevezentsev V.N., Rybin V.V. *Granitsy zeren v metallakh* [Grain boundaries in metals]. Moscow: Metallurgiya, 1980. 156 p.
29. Kuksin A.Yu., Yanilkin A.V. Atomisticheskoe modelirovanie dvizheniya dislokatsii v metallakh v usloviyakh fononnogo treniya [Atomistic simulation of dislocation motion in metals under phonon friction conditions]. *Fizika tverdogo tela – Solid Physics*, 2013, vol. 55, no. 5, pp. 931-939.
30. Kocks U.F., Argon A.S., Ashby M.F. *Thermodynamics and kinetics of slip*. Progress in materials science, vol. 19. Pergamon Press, 1975. 291 p.
31. Nechaeva E.S., Trusov P.V. Constitutive model of semicrystalline polymer material. Implementation algorithm for mezolevel model. *Vycisl. meh. splos. sred – Computational Continuum Mechanics*, 2011, vol. 4, no. 1, pp. 74-89. DOI
32. Nechaeva E.S., Trusov P.V. Constitutive model of semicrystalline polymer material. Implementation algorithm for macro level representative volume. *Vycisl. meh. splos. sred – Computational Continuum Mechanics*, 2011, vol. 4, no. 2, pp. 82-95. DOI
33. Samarskii A.A., Gulin A.V. *Chislennyye metody matematicheskoi fiziki* [Numerical methods of mathematical physics]. – Moscow: Nauchnyi mir, 2000. – 315 p.
34. Trusov P.V., Volegov P.S., Shveykin A.I. *Constitutive elasto-viscoplastic model of FCC-crystals: Theory and application algorithms*. Saarbrücken: LAP LAMBERT Academic Publ., 2011. 147 p.
35. Charles J. Vincent B. Duplex stainless steels for chemical tankers. *Duplex Stainless Steels'97 Proceedings, 5th World conference, Maastricht, Netherlands, 21-23 October 1997. Vol. 2, pp. 727-736.*
36. Dobrzański L.A., Brytan Z., Actis Grande M., Rosso M. Properties of duplex stainless steels made by powder metallurgy, available at: [http://www.archivesmse.org/vol28\\_4/2844.pdf](http://www.archivesmse.org/vol28_4/2844.pdf) (accessed 3 June 2014).
37. Herrera C., Ponge D., Raabe D. Characterization of the microstructure, crystallographic texture and segregation of an as-cast duplex stainless steel slab. *Steel Research International*, 2008, vol. 79, no. 6, pp. 482-488.

Поступила в редакцию 09.03.2014; опубликована в электронном виде 24.06.2014

#### Сведения об авторах

Трусов Петр Валентинович, дфмн, проф., зав.каф., Пермский национальный исследовательский политехнический университет (ПНИПУ), 614990, Пермь, Комсомольский пр., д. 29; e-mail: tpv@matmod.pstu.ac.ru

Кондратьев Никита Сергеевич, асп., ПНИПУ; e-mail: kondratevns@gmail.com