

## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ГЛУБОКОГО ПЛАСТИЧЕСКОГО ДЕФОРМИРОВАНИЯ С ОПИСАНИЕМ ЭВОЛЮЦИИ МИКРОСТРУКТУРЫ\*

П.В. Трусов, *Пермский национальный исследовательский политехнический университет*  
 А.И. Швейкин, *Пермский национальный исследовательский политехнический университет*  
 П.С. Волегов, *Пермский национальный исследовательский политехнический университет*  
 Н.С. Кондратьев, *Пермский национальный исследовательский политехнический университет*  
 А.Ю. Янц, *Пермский национальный исследовательский политехнический университет*  
 Е.С. Макаревич, *Пермский национальный исследовательский политехнический университет*  
 И.Ю. Зубко, *Пермский национальный исследовательский политехнический университет*  
 Э.Р. Шарифуллина, *Пермский национальный исследовательский политехнический университет*

Рассматривается двухуровневая модель для описания неупругого деформирования поликристаллических материалов, в том числе эволюции внутренней структуры. Предложен оригинальный вариант согласования определяющих соотношений различных масштабных уровней, который позволяет, в частности, получить однозначное определение независимой от выбора системы отсчета производной тензора напряжений Коши на макроуровне, входящей в определяющее соотношение макроуровня при рассмотрении больших деформаций. На основе физического анализа предложены законы упрочнения и ротации решеток кристаллитов. С использованием разработанных алгоритмов реализации многоуровневых моделей для простых нагружений выполнены численные эксперименты и проанализированы результаты расчетов. Установлено, что эти результаты находятся в хорошем соответствии с экспериментальными данными. Рассматриваются вопросы, связанные с формированием остаточных мезонапряжений в отдельных зернах поликристалла, остающихся в представительном макрообъеме после его разгрузки.

**Ключевые слова:** математическое моделирование, двухуровневые модели, интенсивные пластические деформации, микроструктура, дислокация, текстура, упрочнение.

Мезо- и микроструктура материала существенным образом эволюционируют в процессе деформирования (особенно в про- цессах, сопровождающихся интенсивными пластическими деформациями – ИПД). С одной стороны, макронагружения (макро-

\* Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты № 10-08-96010-р\_урал\_а, 12-08-01052-а, 12-08-33082-мол\_а\_вед, 12-01-31094-мол\_а, 13-01-96006-р\_урал\_а), грантов Президента РФ № МК-3989.2012.1, МК-390.2013.1, ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009–2013 годы» (мероприятие 1.2.2, Соглашение 14.В37.21.0382).

деформации) являются источником, движущей силой изменения мезо- и микро-структуры; с другой стороны, эволюция мезо- и микро-структуры является фактором, определяющим поведение материала на макроуровне. Таким образом, управляя внутренней структурой, можно управлять свойствами материалов на макроуровне. Поэтому в настоящее время при разработке математических моделей технологических процессов, в нелинейной механике деформируемого твердого тела (МДТТ) одной из наиболее актуальных проблем является построение моделей, описывающих эволю-

цию мезо- и микро-структуры поликристаллических материалов [2, 13].

Следует отметить, что экспериментальные методы разработки технологических процессов, использующих ИПД, требуют существенных материальных и временных затрат, причем изучение эволюции свойств и структуры материала в ходе процесса не представляется возможным (можно только анализировать состояние структуры на момент окончания воздействия), поэтому при решении такого рода задач особенно важную роль играют методы математического моделирования.

## 1. СТРУКТУРА ДВУХУРОВНЕВОЙ МОДЕЛИ НЕУПРУГОГО ДЕФОРМИРОВАНИЯ ПОЛИКРИСТАЛЛОВ

При моделировании неупругого деформирования поликристаллических металлов будет использоваться многоуровневый подход [1, 7, 8]; при этом иерархию масштабных уровней можно определить следующим образом: макроуровень – мезоуровень (уровень кристаллита (зерна, субзерна, фрагмента)) – микроуровень (дислокационная структура) (рис. 1). Структуру конститутивных соотношений рассмотрим на примере двухуровневой (макро- и мезоуровни) модели неупругого изотермического деформирования поликристаллических материалов.

На макроуровне рассматривается представительный объем поликристаллического металла, состоящий из совокупности кристаллитов – элементов мезоуровня.

Конститутивная модель макроуровня представляется следующей совокупностью соотношений (здесь и далее параметры макроуровня обозначаются заглавны-

ми буквами, соответствующие параметры мезоуровня – аналогичными строчными):

$$\left\{ \begin{aligned} \Sigma^t &\equiv \dot{\Sigma} + \Omega^T \cdot \Sigma + \Sigma \cdot \Omega = \mathbf{P} : \mathbf{D}^e = \\ &= \mathbf{P} : (\mathbf{D} - \mathbf{D}^{in}), \\ \Omega &= \Omega(\omega_{(i)}, \mathbf{n}_{(i)}, \sigma_{(i)}), i = 1, \dots, N, \\ \mathbf{P} &= \mathbf{P}(\mathbf{n}_{(i)}, \mathbf{o}_{(i)}), i = 1, \dots, N, \\ \mathbf{D}^{in} &= \mathbf{D}^{in}(\mathbf{d}_{(i)}^{in}, \mathbf{n}_{(i)}, \omega_{(i)}), i = 1, \dots, N, \end{aligned} \right. \quad (1)$$

где  $\Sigma$  – тензор напряжений Коши,  $\mathbf{P}$  – тензор модулей упругости,  $\mathbf{D}$ ,  $\mathbf{D}^e$ ,  $\mathbf{D}^{in}$  – тензор деформации скорости, его упругая и неупругая составляющие, индекс «t» означает независимую от выбора системы отсчета производную,  $\Omega$  – тензор, описывающий движение подвижной системы координат, относительно которой определяется собственно деформационное движение на макроуровне;  $\mathbf{n}_{(i)}$ ,  $\sigma_{(i)}$ ,  $\mathbf{d}_{(i)}^{in}$ ,  $\omega_{(i)}$ ,  $\mathbf{o}_{(i)}$  – тензоры модулей упруго-

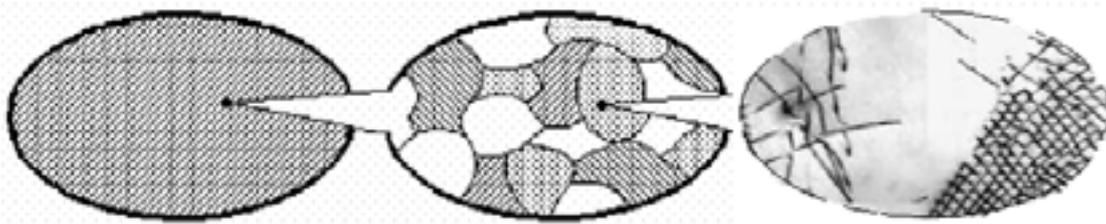


Рис. 1. Схематическое представление иерархии масштабных уровней при моделировании поликристаллических металлов (слева направо: макроуровень, мезоуровень, микроуровень)

сти, напряжений, неупругой составляющей деформации скорости, спина и ориентации  $i$ -го кристаллита,  $N$  – число кристаллитов, образующих представительный макрообъем.

На мезоуровне в качестве элемента принимается кристаллит (зерно, субзерно, фрагмент) с определенным типом решетки (рассматриваются ГЦК, ОЦК, ГПУ-металлы), обладающий соответствующими анизотропными упругими свойствами и набором внутризеренных систем скольжения. Для моделирования взаимодействия зерен кристаллиту приписываются характеристики его границ. Ориентация кристаллической решетки описывается тремя углами Эйлера или кватернионом, задающими ориентацию кристаллографической системы координат (КСК) относительно фиксированной лабораторной системы координат (ЛСК). Поведение кристаллитов описывается моделью мезоуровня, явно учитывающей физические механизмы деформирования.

На уровне кристаллита в двухуровневой модели используется следующая система соотношений (номер кристаллита опущен):

$$\left\{ \begin{array}{l} \boldsymbol{\sigma}^r \equiv \dot{\boldsymbol{\sigma}} - \boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\omega} = \mathbf{n} : \mathbf{d}^e = \\ = \mathbf{n} : (\mathbf{d} - \mathbf{d}^{\text{in}}), \\ \mathbf{d}^{\text{in}} = \sum_{i=1}^K \dot{\gamma}^{(i)} \mathbf{m}_{(S)}^{(i)}, \\ \dot{\gamma}^{(i)} = \dot{\gamma}_0 \left| \frac{\tau^{(i)}}{\tau_c^{(i)}} \right|^{1/n} H(\tau^{(i)} - \tau_c^{(i)}), \quad i = 1, \dots, K, \\ \dot{\tau}_c^{(i)} = f(\gamma^{(j)}, \dot{\gamma}^{(j)}), \quad i, j = 1, \dots, K, \\ \text{соотношения для определения} \\ \text{спина } \boldsymbol{\omega}, \text{ по которому из уравнения} \\ \dot{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \boldsymbol{\sigma}^T = \boldsymbol{\omega} \text{ определяется тензор} \\ \text{ориентации } \mathbf{o}, \\ \hat{\nabla} \mathbf{v} = \hat{\nabla} \mathbf{V}, \end{array} \right. \quad (2)$$

где  $\boldsymbol{\sigma}$  – тензор напряжений Коши,  $\mathbf{n}$  – тензор четвертого ранга упругих свойств кристаллита,  $\mathbf{d}$ ,  $\mathbf{d}^e$ ,  $\mathbf{d}^{\text{in}}$  – тензор деформации скорости, его упругая и неупругая

составляющие на мезоуровне,  $\gamma^{(i)}$ ,  $\tau_c^{(i)}$  – накопленный сдвиг и критическое напряжение сдвига по  $i$ -й системе скольжения (СС),  $\mathbf{m}_{(S)}^{(i)}$  – симметричная часть ориентационного тензора  $i$ -й системы скольжения,  $\mathbf{m}_{(S)}^{(i)} = 1/2(\mathbf{b}^{(i)} \mathbf{n}^{(i)} + \mathbf{n}^{(i)} \mathbf{b}^{(i)})$ ,  $\mathbf{b}^{(i)}$ ,  $\mathbf{n}^{(i)}$  – единичные векторы в направлении вектора Бюргерса и нормали к плоскости скольжения;  $\dot{\gamma}_0$ ,  $n$  – константы материала: характерная скорость сдвигов при равенстве касательных напряжений на СС критическим и константа скоростной чувствительности материала,  $\tau^{(i)}$  – действующее в  $i$ -й системе скольжения касательное напряжение,  $\tau^{(i)} = \mathbf{b}^{(i)} \mathbf{n}^{(i)} : \boldsymbol{\sigma}$ ,  $H(\cdot)$  – функция Хэвисайда,  $K$  – число систем скольжения для рассматриваемого типа решетки,  $\mathbf{o}$  – тензор текущей ориентации кристаллографической системы координат кристаллита относительно фиксированной лабораторной системы координат.

В качестве определяющего соотношения (уравнения состояния) на мезоуровне выступает закон Гука в скоростной форме (2<sub>1</sub>), при этом учитывается геометрическая нелинейность: квазитвердое движение на мезоуровне связывается с поворотом решетки (кристаллографической системы координат); в коротационной производной тензора напряжений Коши  $\boldsymbol{\sigma}^r$  фигурирует тензор спина  $\boldsymbol{\omega}$ , характеризующий скорость вращения кристаллической решетки.

Для передачи воздействия, осуществляемого на макроуровне, на низшие масштабные уровни в модели применяется обобщенная гипотеза Фойгта, согласно которой градиент скорости перемещений для каждого кристаллита совпадает с градиентом скорости перемещений макроуровня  $\hat{\nabla} \mathbf{v} = \hat{\nabla} \mathbf{V}$ .

Ключевым вопросом при построении многоуровневых моделей является связь внутренних переменных верхнего масштабного уровня с переменными мезоуровня. Авторами предлагается подход к определению этих связей на основе обес-

печения полного согласования определяющих соотношений и характеристик напряженно-деформированного состояния на различных масштабных уровнях (напряжений и скоростей деформаций, упругих свойств), согласно которому однозначно определяются скорости неупругих деформаций и конкретизируется вид независимой от выбора системы отсчета производной на верхнем масштабном уровне.

Рассмотрена задача согласования определяющих соотношений различных масштабных уровней в двухуровневых моделях неупругого деформирования, одним из результатов решения которой явилось определение квазитвердого движения на макроуровне  $\Omega$  и неупругой составляющей тензора скорости деформации на макроуровне  $\mathbf{D}^{in}$ , обеспечивающих выполнение априори принимаемых условий согласования:

$$\mathbf{\Pi} = \langle \mathbf{n} \rangle, \quad \Sigma = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle, \quad \mathbf{D} = \langle \mathbf{d} \rangle. \quad (3)$$

Показано, что для выполнения условий (3) в совокупности с системами уравнений (1), (2), тензоры спина  $\Omega$  и неуп-

ругой составляющей тензора деформации скорости  $\mathbf{D}^{in}$  следует определить соотношениями [1]:

$$\Omega = \langle \boldsymbol{\omega} \rangle, \quad (4)$$

$$\mathbf{D}^{in} = \langle \mathbf{d}^{in} \rangle + \mathbf{\Pi}^{-1} : \langle \mathbf{n}' : \mathbf{d}^{in'} \rangle - \mathbf{\Pi}^{-1} : (\langle \boldsymbol{\omega}' \cdot \boldsymbol{\sigma}' \rangle - \langle \boldsymbol{\sigma}' \cdot \boldsymbol{\omega}' \rangle), \quad (5)$$

где штрихами обозначены отклонения соответствующих величин от их средних значений по представительному макрообъему.

Разработанную методику можно применить для широкого класса конститутивных моделей с использованием внутренних переменных (когда соотношения являются дифференциальными, например для соотношений максвелловского типа).

Из результатов, приведенных на рис. 2, видно, что условия согласования обеспечивают полное соответствие между макронапряжениями и осредненными напряжениями мезоуровня, в то время как при использовании «обычного» осреднения спинов и неупругих частей скорости деформации отклонения значительны и возрастают с ростом интенсивности деформаций.

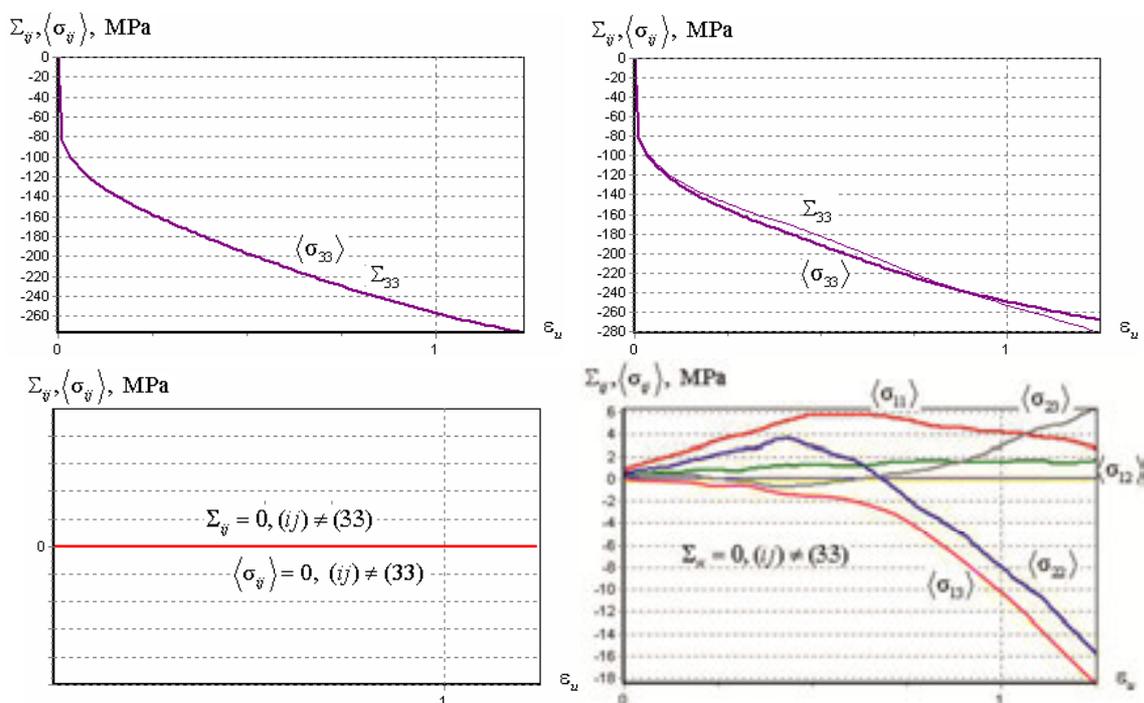


Рис. 2. Эволюция напряжений на макроуровне и осредненных напряжений мезоуровня при использовании условий согласования (слева) и при их отсутствии (справа)

## 2. ОПИСАНИЕ УПРОЧНЕНИЯ В МОНО- И ПОЛИКРИСТАЛЛАХ

Одним из важнейших направлений развития многоуровневых моделей является усовершенствование моделей мезоуровня. Одним из ключевых факторов, определяющих поведение материала, является изменение в процессе деформирования критических напряжений сдвигов по внутризеренным системам скольжения, определяемым соотношением (24) мезоуровня двухуровневой конститутивной модели (1)–(2). Соответствующие соотношения, описывающие скорость изменения критических сдвиговых напряжений от параметров, характеризующих микроструктуру материала, принято называть законами упрочнения. Эти законы по сути своей отражают эволюцию мезо- и микроструктуры материала, а точнее – эволюцию дефектной структуры при неупругом деформировании, в первую очередь – изменения в дислокационной структуре деформируемого материала. Изменение вида законов упрочнения (и значений входящих в него материальных констант) существенным образом влияет на результаты моделирования, поэтому в этих соотношениях важно учитывать по возможности большее число механизмов неупругого деформирования (существенных для исследуемого процесса) на мезо- и микроуровне.

Здесь, следуя [5, 6, 14], предлагается подход к описанию упрочнения в моно- и поликристаллах, связанный с физическим анализом механизмов взаимодействия дислокаций друг с другом и с границами зерен. Рассматриваются некоторые физические механизмы упрочнения, предлагается разделение упрочнения на неориентированное и ориентированное. Первое описывает упрочнение независимо от направления деформирования (образование пересечений дислокаций, жгутов, кос, барьеров Ломера–Коттрелла); такое упрочнение приводит к увеличению критического напряжения сдвига сразу на многих СС. Второе связано с накоплением упругой энергии на «поджатых дислока-

циях» (на различных барьерах), эта энергия может высвободиться при «развороте» направления деформирования. Запасаемая на микродефектах энергия, в свою очередь, разделяется на два типа: не высвобождаемая на микро- и мезодеформациях и высвобождаемая; доля «высвобождаемости» зависит от сложности нагружения. Рассматриваемые механизмы упрочнения являются в значительной степени независимыми, в силу чего принимается гипотеза об аддитивности «вкладов» от различных механизмов в изменение критических напряжений сдвига СС.

В качестве основного слагаемого в законе упрочнения рассматривается степенной закон вида

$$\begin{aligned} \dot{\tau}_{c\ b}^{(k)} &= f^{(k)}(\gamma^{(i)}, \dot{\gamma}^{(i)}) = \\ &= \psi E \left[ \sum_{i=1}^{24} a_i^{(k)} \left( \frac{\gamma^{(i)}}{\sum_{j=1}^{24} \gamma^{(j)}} \right)^{\psi-1} \dot{\gamma}^{(i)} \right], \quad (6) \\ k &= \overline{1, 24}, \quad \psi > 1, \quad \gamma^{(i)} \geq 0, \\ \tau_{c\ b}^{(k)}(0) &= \tau_{c\ b 0}^{(k)}, \end{aligned}$$

учитывающий взаимодействие дислокаций леса и модифицированный с целью учета сложности предшествующего нагружения.

В рамках указанной выше гипотезы об аддитивности скоростей критических напряжений сдвига, степенной закон (6) дополняется слагаемыми, учитывающими основные механизмы возникновения препятствий движению дислокаций при пластическом деформировании, не учтенными первым (степенным) слагаемым:

$$\begin{aligned} \dot{\tau}_c^{(k)} &= f^{(k)}(\gamma^{(i)}, \dot{\gamma}^{(i)}) + \\ &+ f_{ЛК}^{(k)}(\gamma^{(i)}, \dot{\gamma}^{(i)}; \alpha_1^{(i)}, \alpha_2^{(i)}, \dots, \alpha_n^{(i)}) + \\ &+ f_{ан}^{(k)}(\gamma^{(i)}, \dot{\gamma}^{(i)}; \beta_1^{(i)}, \beta_2^{(i)}, \dots, \beta_m^{(i)}) + \\ &+ f_{3ГУ}^{(k)}(\gamma^{(i)}, \dot{\gamma}^{(i)}; \delta_1^{(i)}, \delta_2^{(i)}, \dots, \delta_p^{(i)}), \\ i, k &= \overline{1, 24}, \end{aligned} \quad (7)$$

где  $\alpha_1^{(i)}, \alpha_2^{(i)}, \dots, \alpha_n^{(i)}$ ;  $\beta_1^{(i)}, \beta_2^{(i)}, \dots, \beta_m^{(i)}$  и  $\delta_1^{(i)}, \delta_2^{(i)}, \dots, \delta_p^{(i)}$  – наборы внутренних переменных, характеризующих соответствующие механизмы (вообще говоря, принимающие различные значения в каждый момент деформирования для разных систем скольжения) [14]. Здесь слагаемое  $f_{ЛК}^{(k)}(\gamma^{(i)}, \dot{\gamma}^{(i)}; \alpha_1^{(i)}, \alpha_2^{(i)}, \dots, \alpha_n^{(i)})$  описывает дополнительное упрочнение за счет реакций на расщепленных дислокациях (с образованием барьеров Ломера–Коттрелла),  $f_{ан}^{(k)}(\gamma^{(i)}, \dot{\gamma}^{(i)}; \beta_1^{(i)}, \beta_2^{(i)}, \dots, \beta_m^{(i)})$  учитывает уменьшение критических напряжений при реверсивном скольжении за счет аннигиляции дислокаций,  $f_{ЗГВ}^{(k)}(\gamma^{(i)}, \dot{\gamma}^{(i)}; \delta_1^{(i)}, \delta_2^{(i)}, \dots, \delta_p^{(i)})$  отвечает за дополнительное упрочнение, возникающее при взаимодействии внутризеренных дислокаций с границами зерен.

Подход к описанию неориентированного упрочнения иллюстрируется на примере описания дополнительного упрочнения за счет образования барьеров Ломера–Коттрелла. Определяются внутренние переменные, дополнительная функция упрочнения  $f_{ЛК}^{(i)}$  принимается в виде

$$f_{ЛК}^{(i)}(\gamma_{ЭДУ}, \dot{\gamma}^{(i)}, \gamma^{(j)}) = \xi_1 \tau_c^{(i)} \left( 1 - \frac{\gamma_{ЭДУ}}{\gamma_{ЭДУ}^*} \right) \times \\ \times H \left( 1 - \frac{\gamma_{ЭДУ}}{\gamma_{ЭДУ}^*} \right) \left( \int_0^t f_{ЛК}^{(i)} d\tau + f_0^{(i)} \right)^{-1} \times \\ \times \dot{\gamma}^{(i)} \left( \sum_{j \neq i}^{N^*} \gamma^{(j)} + \gamma_0^b \right), \quad (8)$$

где  $\gamma_{ЭДУ}$  – энергия дефекта упаковки (ЭДУ) исследуемого материала,  $\gamma_{ЭДУ}^*$  – критическое значение ЭДУ материала, при превышении которого данный механизм полагается малозначимым,  $N^*$  – число СС, сопряженных к данной (т.е. СС, дислокации которых могут реагировать с дислокациями рассматриваемой СС с образованием барьеров Ломера–Коттрелла),  $\tau_c^{(i)}$  – текущее критическое напряжение,  $\gamma_0^b$  – ма-

лая константа,  $\xi_1$  – материальная константа,  $H$  – функция Хэвисайда.

Рассматривается ориентированное упрочнение за счет аннигиляции дислокаций, «поджатых» на препятствиях, при смене направления деформирования, а также за счет взаимодействия внутризеренных дислокаций с границами зерен в случае деформирования поликристалла, для чего подробно рассмотрены физика процесса аннигиляции и факторы, влияющие на уменьшение критического касательного напряжения на данной СС в результате аннигиляции дислокаций [5]. Для учета высвобождаемой упругой энергии в соотношении для  $f_{ан}^{(i)}$  введен дополнительный множитель, учитывающий сложность нагружения по всем СС (здесь рассматривается ГЦК-решетка):

$$f_{ан}^{(i)}(\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_m) = \frac{d\tau_{ан}^{(i)}}{dt} = \\ = -\xi_2 \tau_{ан}^{(i)} \frac{\dot{\gamma}^{(i)}}{\sum_j \dot{\gamma}^{(j)}} (\gamma^{(i+12)} + \gamma_0^a), \quad (9)$$

$$\tau_{ан}^{(i)} \Big|_{t=0} = \tau_{c0}^{(i)}, \quad i = \overline{1, 24},$$

где  $\sum_j \dot{\gamma}^{(j)}$  – суммарный накопленный сдвиг,  $\gamma_0^a$  – малый параметр,  $\xi_2$  – материальная константа.

При описании зернограницного упрочнения принимается модель прохождения дислокации через границу с образованием в ней дислокации ориентационного несоответствия, затрудняющей в дальнейшем движение решеточных дислокаций. Дополнительное зернограницное упрочнение описывается при помощи соотношения

$$f_{ЗГВ}^{(i)}(\gamma^{(i)}, \dot{\gamma}^{(i)}, \xi) = \eta \gamma^{(i)} \dot{\gamma}^{(i)} \sum_{k=1}^P \frac{S_k}{V_0} \xi_{ik}, \quad (10)$$

где  $S_k$  – площадь зерна, «приходящаяся» на данную СС,  $V_0$  – объем зерна,  $P$  – количество плоских участков (фасеток), аппроксимирующих границы зерна, мера разориентации  $\xi_{jk}$  определяется по мини-

мальному значению для рассматриваемой СС данного зерна  $j$ , плоского участка границы  $k$  и всех СС  $l$  соседнего зерна:

$$\xi_{jk} = \min_{l=1,24} \{ N^{(k)} \cdot (b^{(l)} - b^{(j)}) \}, \text{ где } N^{(k)} - \text{нормаль к плоскому участку границы.}$$

### 3. ОПИСАНИЕ РОТАЦИЙ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ

Наиболее популярными моделями поворота решетки являются модель стесненного поворота Тейлора, определяющая спин решетки как разность тензора вихря и антисимметричной части тензора пластических сдвигов, и модель, идентифицирующая ротацию решетки с поворотом, определяемым ортогональным тензором  $R^e$ , входящим в полярное разложение градиента упругой деформации ( $F^e = R^e \cdot U^e$ ).

В работе [11] показано, что при квазистатическом деформировании рассмотренные модели поворотов решетки в силу малости упругих деформаций будут давать незначительно отличающиеся результаты, что и подтверждается многочисленными результатами по моделированию текстурообразования.

В качестве серьезного недостатка этих моделей следует отметить отсутствие в них учета взаимодействия соседних зерен в поликристалле; по существу, зерна рассматриваются обособленно. При рассмотрении поликристаллических материалов, для которых можно пренебречь взаимодействием дислокаций в соседних зернах, например, при наличии «толстых» границ аморфного строения в полимерных полукристаллических материалах, применение данных моделей достаточно обосновано. Однако для металлов экспериментально подтверждено (например, в работах [4, 9]), что существенную роль в поворотах решетки играет несовместность скольжения дислокаций в соседних зернах. В связи с этим рассмотрим модель ротации решеток зерен, основанную на явном учете последней.

Скорость поворота (спин) решетки  $\omega$  представляется суммой двух составляющих. Первая составляющая  $\omega_1$  описывает поворот решетки вместе с материалом зерна при наложенном кинематическом

воздействии. Связывая материальный поворот с ортогональным тензором, сопровождающим упругую деформацию, данную составляющую предлагается определять как  $\omega_1 = w_{R^e} = \dot{R}^e \cdot R^{eT}$ . Вторая составляющая скорости поворота  $\omega_2$  характеризует ротацию собственно решетки кристаллита, обусловленную взаимодействием с окружением.

Для характеристики взаимодействия кристаллита (зерна, субзерна, фрагмента) с окружением для каждого кристаллита вводится еще одна внутренняя переменная – действующий на него момент сил, определяемый тензором (2-го ранга) моментных напряжений  $\mu$ . Предполагается аддитивность скоростей изменения моментных напряжений

$$\mu^r = \sum_{m=1}^M (\mu^r)^m, \quad (11)$$

где  $(\cdot)^r$  – коротационная производная (со спином подвижной системы координат  $\omega$ , т.е. скоростью вращения кристаллической решетки),  $(\mu^r)^m$  – составляющая скорости моментных напряжений в результате несовместности сдвига в данном кристаллите со сдвигами в соседнем  $m$ -м кристаллите,  $M$  – число соседних кристаллитов. Эволюция вектора-момента  $m$  (индекс опущен), ассоциированного с тензором  $\mu^m$  ( $m = \frac{1}{2} \epsilon : \mu$ ,  $\mu = -\epsilon \cdot m$ ,  $\epsilon$  – тензор Леви–Чивита), определяется из анализа несовместности движения дислокаций на границе кристаллитов следующим соотношением [5]:

$$m^r = \mu N \times \left[ \sum_i^K \dot{\gamma}^i n^i b^i - \sum_j^K \dot{\gamma}^{j(m)} n^{j(m)} b^{j(m)} \right] \cdot N, \quad (12)$$

где  $\mu = \lambda G$  – параметр модели, характе-

ризирующий реакцию системы на несовместность сдвигов,  $G$  – модуль сдвига,  $\lambda$  – экспериментально определяемый (безразмерный) параметр,  $\dot{\gamma}^i$ ,  $\dot{\gamma}^{j(m)}$  – скорости сдвигов,  $\mathbf{b}^i$ ,  $\mathbf{b}^{j(m)}$  – единичные векторы вдоль векторов Бюргера,  $\mathbf{n}^i$ ,  $\mathbf{n}^{j(m)}$  – нормали для систем скольжения в исследуемом и соседнем кристаллитах соответственно,  $K$  – число систем скольжения,  $\mathbf{N}$  – внешняя для анализируемого кристаллита нормаль к границе с соседним кристаллитом ( $\mathbf{N} = \mathbf{q}^m$ ), эволюция нормалей к границам определяется известным соотношением [3] для нормалей к материальным площадкам  $\dot{\mathbf{N}} = (\mathbf{N} \cdot \mathbf{d} \cdot \mathbf{N})\mathbf{N} - \hat{\nabla} \mathbf{v} \cdot \mathbf{N}$ .

Составляющая спина решетки  $\omega_2$  определяется соотношением

$$\omega_2 = \begin{cases} \frac{1}{A} \boldsymbol{\mu}^r + \frac{1}{H} \boldsymbol{\mu}, & \text{при } \|\boldsymbol{\mu}\| = \mu_c \\ & \text{и } \boldsymbol{\mu} : \boldsymbol{\mu}^r \geq 0, \\ \frac{1}{A} \boldsymbol{\mu}^r, & \text{в противном случае,} \end{cases} \quad (13)$$

где  $\|\boldsymbol{\mu}\| = \sqrt{\boldsymbol{\mu} : \boldsymbol{\mu}}$  – интенсивность тензора моментных напряжений,  $\mu_c = \mu_c(\Psi)$  – текущее критическое моментное напряжение, определяемое экспериментально,

$\Psi = \int_{\tau=0}^t \sqrt{\boldsymbol{\omega} : \boldsymbol{\omega}} d\tau$  – накопленный решеточ-

ный поворот.

Согласно (13), составляющая спина решетки  $\omega_2$  характеризует вращение решетки кристаллита, инициированное несовместностью движения дислокаций в соседствующих кристаллитах.

Предложенные соотношения (11)–(13) замыкают двухуровневую модель неупругого деформирования поликристаллических металлов. В работе [5] предлагается развитие модели (11)–(13) для описания реальной кинематики пластических разворотов и фрагментации кристаллитов от границ.

Одной из ключевых характеристик эволюционирующей структуры является функция распределения ориентаций (ФРО) решеток кристаллитов (ориентаций кристаллографических систем координат кристаллитов относительно фиксированной лабораторной системы координат), которая определяет анизотропию свойств на макроуровне. На рис. 3 приведены характеризующие ФРО прямые полюсные фигуры, полученные при моделировании, и соответствующие экспериментальные данные.

Анализируя рис. 3, можно отметить, что полученные результаты находятся в удовлетворительном соответствии с опытными данными: тенденция текстуробразования улавливается четко.

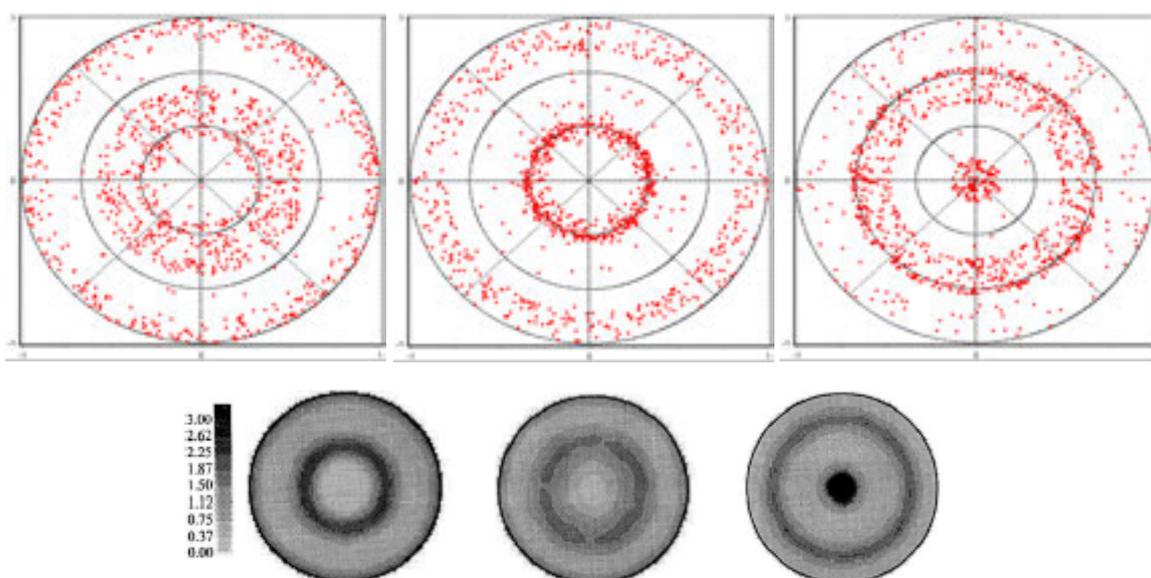


Рис. 3. Прямые полюсные фигуры после осадки ( $\epsilon_u = 1$ ) для направлений  $[111]$ ,  $[100]$ ,  $[110]$  (проецирование с  $OX_3$ ) при использовании условий согласования и соответствующие опытные данные [13]

#### 4. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОСТАТОЧНЫХ МЕЗОНАПРЯЖЕНИЙ В ЗЕРНАХ

Остаточные напряжения (ОН) возникают почти при всех технологических процессах термической и механической обработки: обработки металлов давлением (прокатке, волочении), закалке, сварке, литье, физико-термической обработке, многих видах обработки резанием и т.д. [3].

Остаточными напряжениями принято называть такие напряжения, которые существуют и уравновешены внутри тела после устранения воздействий, вызвавших их появление (поверхностные и массовые силы, температурные воздействия, фазовые превращения и т.д.) [10]. Они связаны с анизотропией кристаллов, ориентацией кристаллографических плоскостей, наличием различных фаз и т.д.

В конечном счете, остаточные напряжения любого масштабного уровня оказывают значительное влияние на прочностные характеристики изделия; в зависимости от знака компонент ОН и условий работы детали в составе конструкции остаточные напряжения могут оказывать как позитивное, так и негативное влияние, поэтому определение остаточных напряжений является крайне важным. Как было сказано выше, остаточные напряжения возникают при различных технологических процессах, но, в конечном счете, их появление связано с несовместностью упругих деформаций, которые вызваны различными факторами (в том числе различной ориентацией кристаллических решеток зерен). Отметим, что исследуемые в настоящей работе ОН не попадают под общепринятую классификацию, так как они уравновешены на масштабе представительного объема материала, поэтому их уровень (по приведенной классификации) выше 2-го, то есть они сосредоточены на масштабах, больших размера зерна, но ниже 1-го – локализованы на масштабе ниже масштаба изделия, заготовки. Исходя из этого для их обозначения в дальнейшем будет использоваться термин «остаточные мезонапряжения» (ОМН).

При оценке уровня ОМН, возникающих

в процессах нагрузки-разгрузки, необходимо разработать численную процедуру снятия напряжений на макроуровне. Отметим особенность, которая возникает при численной реализации разгрузки представительного объема при использовании гипотезы Фойгта. На практике разгрузка реализуется устранением всех распределенных нагрузок на границах образца. В силу использования гипотезы Фойгта прямая численная реализация вышеприведенного способа не представляется возможной. В связи с этим разгрузка реализуется с применением пошаговой процедуры, описанной ниже, на каждом шаге которой определяется тензор деформации скорости, в таком случае условие завершения процесса разгрузки выглядит следующим образом:  $\Sigma = \mathbf{0}$  (осредненные по представительному макрообъему напряжения равны нулевым). Стоит отметить, что вопрос о траектории, по которой макронапряжения могут быть приведены к нулю, остается открытым, поэтому в рассматриваемой процедуре реализуется простейший способ – лучевая траектория в пространстве напряжений.

Остановимся подробнее на итерационной процедуре. Допустим, при произвольном предшествующем этапе нагружения были достигнуты макронапряжения  $\Sigma$  в представительном макрообъеме, тогда для реализации очередной итерации разгрузки необходимо выполнение следующего условия:

$$D : \{\dot{\Sigma} = C : (D - D^m) - \Sigma \cdot \Omega + \Omega \cdot \Sigma = -\lambda \Sigma, \lambda > 0\}, \quad (14)$$

то есть необходимо подобрать такое  $D$  (в силу того, что при использовании гипотезы Фойгта нет возможности варьировать непосредственно напряжения), чтобы тензор скорости напряжений  $\dot{\Sigma}$  был пропорционален текущим напряжениям  $\Sigma$ , взятых с обратным знаком. Найденная из (14) скорость деформирования  $D$  используется в соотношениях мезоуровня (модель мезоуровня) для определения неупругих деформаций, по которым восста-

навливается тензор спина для текущего кристаллита, далее из условий согласования уровней определяются спин квазитвердого движения на макроуровне. Зная текущий тензор макронапряжений, спин системы координат, связанной с представительным объемом, находим скорость макронапряжений и, окончательно, проводится интегрирование для определения напряжений на новой итерации:

$$\Sigma^{(k+1)} = \Sigma^{(k)} + \dot{\Sigma}^{(k)} \Delta t = (1 - \lambda \Delta t) \Sigma^{(k)}. \quad (15)$$

Рассмотренная процедура позволяет итерационно привести все компоненты напряжений на макроуровне к значению машинного нуля. Коэффициент пропорциональности  $\lambda$  имеет размерность  $c^{-1}$  и определяет скорость изменения напряжений.

На рис. 4, вверху, представлено распределение интенсивностей напряжений в кристаллитах непосредственно после упругой разгрузки представительного объема по алгоритму (14)–(15). Заметно,

что в кристаллитах присутствуют напряжения при полной упругой разгрузке ПО, таким образом, можно говорить о формировании остаточных мезонапряжений.

На рис. 4, внизу, изображена гистограмма распределения интенсивностей напряжений в кристаллитах после упругой разгрузки ПО при учете ротации. В этом случае распределение становится более гладким, с выраженным пиком, при этом интервал распределения сужается относительно случая без ротации (ширина без учета ротации – 32 МПа, с учетом – 20 МПа). Стоит отметить, что среднее значение интенсивности остаточных напряжений при учете ротации ниже на ~15%, несмотря на то, что интенсивности напряжений в ходе нагружения постепенно стягиваются к максимальному значению в 74 МПа. Также было замечено, что пик распределения интенсивности остаточных напряжений смещается в область меньших значений.

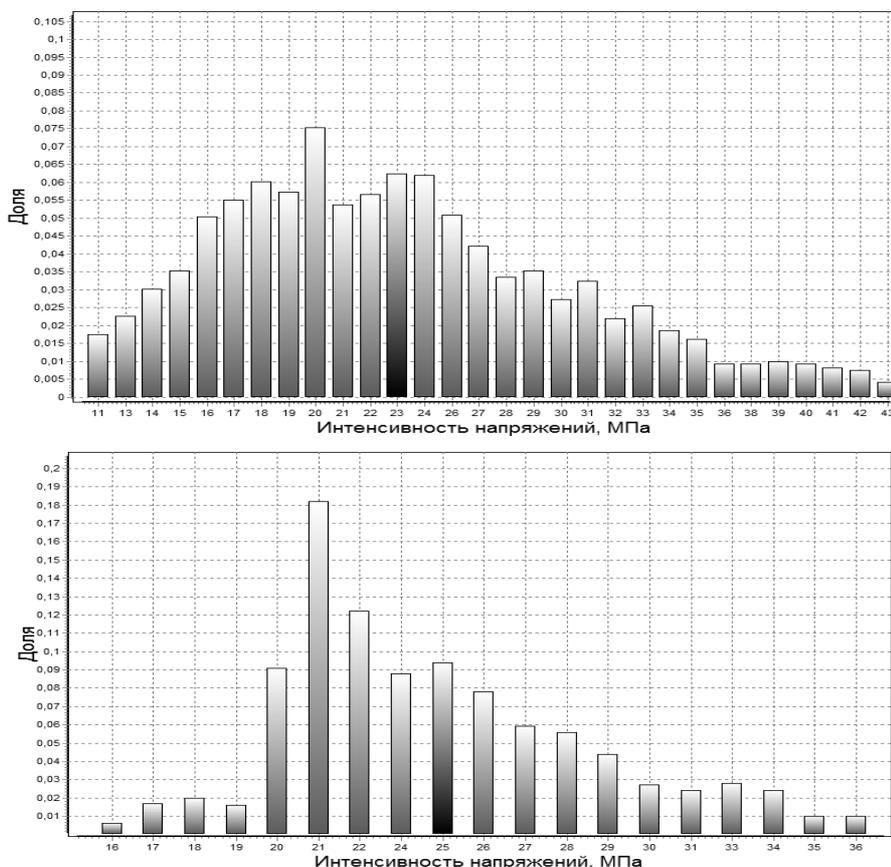


Рис. 4. Гистограмма распределения интенсивности напряжений в кристаллитах после разгрузки: вверху – без учета ротаций, внизу – с учетом ротаций зерен (черным цветом обозначено среднее значение)

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в данной статье рассмотрена двухуровневая модель поликристаллических металлов, построенная в рамках общей идеологии многоуровневого моделирования, для которой на основе физического анализа предложены законы упрочнения, учитывающие все наиболее важные механизмы дислокационных взаимодействий. Для поликристаллических металлов предложена модель ротаций решеток кристаллитов, учитывающая несовместность скольжения дислокаций в соседних зернах.

Разработана методика установления связей параметров различных масштабных уровней, основанная на согласовании определяющих уравнений на этих уровнях и обеспечивающая соответствие мер напряженного и деформированного состояний на них. Предложенный подход приводит к конкретизации вида определяющего соотношения на макроуровне (и в частности – вида независимой от выбора системы отсчета производной). По су-

ществу, соотношения низшего уровня «транспортируются» на верхний, разрешая вопрос корректной их формулировки для геометрически и физически нелинейной задачи.

Результаты моделирования показывают необходимость применения предложенных условий межуровневого согласования, удовлетворительное соответствие экспериментальным данным.

Показано, что в случае нагружения до достижения глубоких пластических деформаций и последующей полной упругой разгрузки для представительного макрообъема в целом в отдельных кристаллитах присутствуют значительные (по величине) остаточные мезонапряжения; проанализировано распределение этих напряжений для различных видов нагружения. Можно отметить, что рассмотрение остаточных мезонапряжений открывает широкие возможности для проведения уточненного прочностного анализа материалов и конструкций.

### Библиографический список

1. Многоуровневые модели неупругого деформирования материалов и их применение для описания эволюции внутренней структуры / П.В. Трусов, А.И. Швейкин, Е.С. Нечаева, П.С. Волегов // Физическая мезомеханика. – 2012. – Т. 15. – № 1. – С. 33–56.
2. Моделирование эволюции структуры поликристаллических материалов при упругопластическом деформировании / П.В. Трусов, В.Н. Ашихмин, П.С. Волегов, А.И. Швейкин // Ученые записки Казанского университета. Физико-математические науки. – 2010. – Т. 152. – № 4. – С. 225–237.
3. Поздеев А.А., Няшин Ю.И., Трусов П.В. Остаточные напряжения: теория и приложения. – М.: Наука, 1982. – 232 с.
4. Рыбин В.В. Большие пластические деформации и разрушение металлов. – М.: Металлургия, 1986. – 224 с.
5. Трусов П.В., Волегов П.С., Швейкин А.И. Конститутивная упруговязкопластическая модель ГЦК-поликристаллов: теория, алгоритмы, приложения: монография. – Saarbrücken: LAP LAMBERT Academic Publishing, 2011. – 147 с.
6. Трусов П.В., Волегов П.С., Янц А.Ю. Описание внутризеренного и зернограничного упрочнения моно- и поликристаллов // Научно-технические ведомости СПбГПУ, сер. «Физико-математические науки». – 2010. – № 2(98). – С. 110–119.
7. Трусов П.В., Швейкин А.И. Многоуровневые физические модели моно- и поликристаллов. Прямые модели // Физическая мезомеханика. – 2011. – Т. 14. – № 5. – С. 5–30.
8. Трусов П.В., Швейкин А.И. Многоуровневые физические модели моно- и поликристаллов. Статистические модели // Физическая мезомеханика. – 2011. – Т. 14. – № 4. – С. 17–28.
9. Физическая мезомеханика и компьютерное конструирование материалов: В 2 т. / В.Е. Панин, В.Е. Егорушкин, П.В. Макаров [и др.] – Новосибирск: Наука. Сибирская изд. фирма РАН, 1995. – Т. 1. – 298 с. Т. 2. – 320 с.
10. Фридман Я.Б. Механические свойства металлов. 3-е изд. В 2 ч. – М.: Машиностроение, 1974. – 472с.
11. Швейкин А.И., Ашихмин В.Н., Трусов П.В. О моделях ротации решетки при деформировании металлов // Вестник ПГТУ. Механика. – 2010. – № 1. – С. 111–127.

12. *Anand L.* Single-crystal elasto-viscoplasticity: application to texture evolution in polycrystalline metals at large strains // *Computer methods in applied mechanics and engineering*. – 2004. – Vol. 193. – P. 5359–5383.
13. Constitutive relations and their application to the description of microstructure evolution / *P.V. Trusov, V.N. Ashikhmin, P.S. Volegov, A.I. Shveykin* // *Physical Mesomechanics*. – 2010. – Vol. 13. – Is. 1–2. – P. 38–46.
14. *Trusov P.V., Volegov P.S.* Internal variable constitutive relations and their application to description of hardening in single crystals // *Physical Mesomechanics*. – 2010. – Vol. 13. – Is. 3–4. – P. 152–158.

**MATHEMATICAL MODELING OF THE INTENSIVE PLASTIC DEFORMATION  
WITH THE DESCRIPTION OF MICROSTRUCTURE EVOLUTION**

P.V. Trusov, A.I. Shveykin, P.S. Volegov, N.S. Kondratyev, A.Yu. Yanz,  
E.S. Makarevich, I.Yu. Zoubko, E.R. Sharifullina

The article deals with the statement of the two-level model of polycrystalline materials inelastic deformation, including the description of the internal structure evolution. The paper puts forward the original version of the agreement conditions for defining relations of different scale levels, the proposed method of coordination also allows unambiguous definition derivative Cauchy stress tensor at the macro level which is independent of the reference system choice, and it is necessary for the formulation of constitutive relations for large deformations. Based on the physical analysis hardening laws and relations for crystal lattices rotations of crystallites are proposed. With the use of the developed algorithms on multi-level models for simple load cases experiments have been performed and the results of the calculations have been analyzed. It was found that these results are in good agreement with the experimental data. The problems associated with the formation of residual mesostresses in individual grains in the case of polycrystalline left in macro volume after its stress release are studied.

*Keywords: mathematical modeling, intensive plastic deformation, microstructure, dislocation, texture, hardening.*

**Сведения об авторах**

*Трусов Петр Валентинович*, доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой математического моделирования систем и процессов, Пермский национальный исследовательский политехнический университет (ПНИПУ), 614990, г. Пермь, Комсомольский пр., 29; e-mail: [trv@matmod.pstu.ac.ru](mailto:trv@matmod.pstu.ac.ru)

*Швейкин Алексей Игоревич*, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры математического моделирования систем и процессов, ПНИПУ; e-mail: [alexsh59@bk.ru](mailto:alexsh59@bk.ru)

*Волегов Павел Сергеевич*, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры математического моделирования систем и процессов, ПНИПУ; e-mail: [crocinc@mail.ru](mailto:crocinc@mail.ru)

*Кондратьев Никита Сергеевич*, ассистент кафедры математического моделирования систем и процессов, ПНИПУ; e-mail: [kondratevns@gmail.com](mailto:kondratevns@gmail.com)

*Янц Антон Юрьевич*, аспирант кафедры математического моделирования систем и процессов, ПНИПУ; e-mail: [maximus5.59@gmail.com](mailto:maximus5.59@gmail.com)

*Макаревич Елена Сергеевна*, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры математического моделирования систем и процессов, ПНИПУ; e-mail: [helen\\_ses@perm.ru](mailto:helen_ses@perm.ru)

*Зубко Иван Юрьевич*, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры математического моделирования систем и процессов, ПНИПУ; e-mail: [zoubko@list.ru](mailto:zoubko@list.ru)

*Шарифуллина Эльвира Ривгатовна*, аспирант кафедры математического моделирования систем и процессов, ПНИПУ; e-mail: [elvira16\\_90@mail.ru](mailto:elvira16_90@mail.ru)

*Материал поступил в редакцию 01.07.2013 г.*