

## МНОГОУРОВНЕВАЯ МОДЕЛЬ ДЛЯ ОПИСАНИЯ ТВЕРДОТЕЛЬНЫХ ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СПЛАВАХ\*

П.В. Трусов, *Пермский национальный исследовательский политехнический университет*

П.С. Волегов, *Пермский национальный исследовательский политехнический университет*

И.Л. Исупова, *АО «Научно-исследовательский институт полимерных материалов»*

Н.С. Кондратьев, *Пермский национальный исследовательский политехнический университет; Научно-исследовательский институт механики Национального исследовательского Нижегородского государственного университета им. Н.И. Лобачевского*

Е.С. Макаревич, *Пермский национальный исследовательский политехнический университет*

Н.Д. Няшина, *Пермский национальный исследовательский политехнический университет*

Т.В. Останина, *Пермский национальный исследовательский политехнический университет*

Э.Р. Шарифуллина, *Пермский национальный исследовательский политехнический университет*

А.И. Швейкин, *Пермский национальный исследовательский политехнический университет*

А.Ю. Янц, *Пермский национальный исследовательский политехнический университет*

Предложена трехуровневая модель неупругого деформирования стали с учетом фазовых превращений при термомеханических воздействиях. В рассмотрение включены три масштабных уровня: макроуровень I (уровень конструкции), макроуровень II (уровень представительного макрообъема), мезоуровень (уровень кристаллита – отдельного зерна или субзерна). Уровни связаны между собой посредством внутренних переменных, которые описывают деформирование и фазовые превращения на более глубоком уровне.

Разработан и реализован вычислительный алгоритм в рамках статистического подхода для представительного объема мезо- и макроуровня II на основе сформулированной математической постановки. Разработан блок идентификации параметров закона упрочнения и проверки адекватности вычислительных результатов.

Проведены вычислительные эксперименты для представительного объема макроуровня II при деформировании одноосным растяжением, простым сдвигом и сложным нагружением. Для указанных типов нагружения получены зависимость доли образующегося мартенсита от интенсивности деформации и деформационные кривые. Полученные расчетные зависимости находятся в хорошем количественном соответствии с известными из литературы экспериментальными данными.

Предложенная модель применена для описания поведения титанового сплава при высокотемпературном пластическом деформировании, которое сопровождается процессами динамического возврата и рекристаллизации.

\* Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и Правительства Пермского края (грант № 13-01-96006 р\_Урал\_a).

Рассмотрены процессы механической обработки металлов – осадка, стесненная осадка, простой сдвиг. Показано, что результаты моделирования, в том числе характеристики эволюционирующей структуры, удовлетворительно согласуются с опытными данными.

**Ключевые слова:** математическая модель, физические теории пластичности, многоуровневая модель, термомеханическая обработка, твердотельные фазовые переходы.

Современные технологии термомеханической обработки металлов позволяют получать металлические сплавы с требуемым набором физико-механических свойств. Под воздействием температуры и механической нагрузки происходят изменения микроструктуры: размеров, формы, ориентации зерен и субзерен, дислокационной субструктуры, обусловленные скольжением и переползанием дислокаций, двойникованием, диффузионными и мартенситными фазовыми переходами.

Целью данного проекта являлась разработка многоуровневой конститутивной модели для описания твердотельных фазовых превращений в поликристаллических многокомпонентных сплавах, происходящих на микро- и мезоуровнях в процессах термомеханической обработки.

Для решения поставленной задачи использовался подход, основанный на построении многоуровневых иерархических моделей (рис. 1), который позволяет включать в рассмотрение основные физические механизмы, действующие на мезоуровне и определяющие эволюцию микроструктуры, а значит – свойства металла в целом (ротация элементов структуры,

двойникование, формирование субструктур в процессе деформирования) [1, 2, 5, 8, 10, 12–21]. Для корректного описания процессов твердотельных фазовых превращений при построении конститутивной модели на мезоуровне использованы несимметричные меры деформированного состояния [4, 9, 22].

На каждом масштабном уровне записывается своя математическая постановка задачи, позволяющая описывать наиболее важные физические процессы, реализуемые на данном уровне.

Определяющее соотношение макроуровня представляют собой анизотропный закон Гука в скоростной релаксационной форме [2, 13, 14]:

$$\begin{aligned} \Sigma^{CR} &\equiv \dot{\Sigma} + \Sigma \cdot \Omega + \Omega^T \cdot \Sigma = \\ &= \Pi : (\mathbf{Z}_r - \mathbf{Z}_r^{in} - \mathbf{A}\dot{\Theta}). \end{aligned} \quad (1)$$

Основные физические механизмы, лежащие в основе неупругого (пластического и трансформационного) деформирования и определяющие изменение внутренней структуры и свойств металла описываются с помощью уравнений мезоуровня. В качестве меры скорости деформации выбрана несимметричная мера –

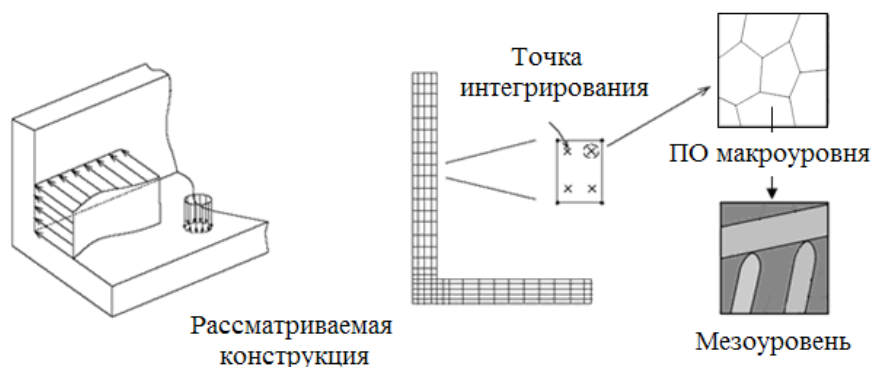


Рис. 1. Схематическое представление масштабных уровней для задачи определения напряженно-деформированного состояния

транспонированный градиент относительной скорости перемещений (в относительном движении, фиксируемом подвижным наблюдателем в жесткой подвижной системе отсчета мезоуровня). Принята гипотеза об аддитивности упругой, неупругой и термической составляющих меры скорости деформации. Неупругая составляющая складывается из пластических и трансформационных (связанных с фазовыми переходами) деформаций. Пластическая деформация определена через ориентационный тензор систем скольжения или двойникования в кристаллических решетках каждой фазы и скорость сдвига для всех возможных систем. Скорость сдвига по системе скольжения определяется согласно вязкопластическому закону. Сопротивление сдвигу определяется с учетом деформационного, латентного упрочнений и упрочнения, связанного с образованием новой фазы. Трансформационная деформация для мартенситных превращений выражена через ориентационный тензор трансформационных систем и скорость изменения доли мартенситной фазы на каждой системе [2, 11]:

$$\left\{ \begin{aligned} \boldsymbol{\sigma}^{cr} &\equiv \dot{\boldsymbol{\sigma}} - \boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\omega} = \\ &= \mathbf{n} : (\boldsymbol{\zeta}_r - \boldsymbol{\zeta}_r^{in} - \boldsymbol{\alpha}\dot{\theta}), \\ \boldsymbol{\zeta}_r^{in} &= \\ &= \sum_i^{N_1} \xi_i \sum_{k=1}^n \mathbf{P}_i^{(k)} \dot{\gamma}_i^{(k)} + \sum_k^{24} \dot{\xi}_M^{(k)} \mathbf{s}^{(k)} \mathbf{m}^{(k)}, \\ \dot{\gamma}_i^{(k)} &= \\ &= \dot{\gamma}_{0i}^{(k)} H \left( \tau_i^{(k)} - \tau_{ci}^{(k)} \right) \left| \frac{\tau_i^{(k)}}{\tau_{ci}^{(k)}} \right|^{1/m_{ci}} \text{sign} \left( \tau_i^{(k)} \right), \\ \dot{\tau}_{ci}^{(k)} &= f \left( \gamma^{(j)}, \dot{\gamma}^{(j)}, \theta, \dot{\theta} \right), \\ \boldsymbol{\omega} &= \dot{\boldsymbol{\theta}} \cdot \boldsymbol{\theta}^T, \\ \boldsymbol{\zeta} &= \mathbf{Z}, \quad \boldsymbol{\zeta}_r = \boldsymbol{\zeta} - \boldsymbol{\omega} = \mathbf{v} \hat{\nabla} - \boldsymbol{\omega}, \\ \frac{\partial \xi_i}{\partial t} &= -l_{ij} \left( \frac{1}{\theta} \frac{\delta f}{\delta \xi_i} - \frac{1}{\theta} \frac{\delta f}{\delta \xi_j} \right). \end{aligned} \right. \quad (2)$$

Тензоры физических параметров в многофазной системе определены по пра-

вилу смесей. Тензор спина (скорости поворота) решетки, необходимый для записи коротационной производной тензора напряжений, определен из модели полностью стесненного поворота Тейлора. Изменение объемной доли фаз описано кинетическим соотношением, полученным в рамках термодинамики необратимых процессов в терминах свободной энергии для многофазной системы, которая зависит от упругой деформации и температуры [2, 3]. На мезоуровне учитывалось изменение полей температуры и концентрации компонентов сплава.

На основе метода конечных элементов разработан алгоритм на языке FORTRAN, реализующий модели различных масштабных уровней. В алгоритме решения задачи теплопроводности реализовано распараллеливание вычислений на основе технологии OpenMp.

Проведен вычислительный эксперимент по описанию деформирования представительного объема макроуровня для стали AISI 301, содержащего 3375 зерен [2, 15]. Деформирование при одноосном растяжении, простом сдвиге и сложном нагружении (растяжение – сдвиг, сдвиг – растяжение). Для указанных типов нагружения получены кривые зависимости интенсивности напряжений и доли образующегося мартенсита от интенсивности накопленной деформации.

На рис. 2, 3 представлены результаты вычислительного эксперимента на сложное нагружение. Можно отметить, что после излома траектории деформирования наблюдается характерное снижение интенсивности напряжений (рис. 2); при изменении величины накопленных деформаций первого этапа деформирования вид зависимости интенсивности напряжений от интенсивности деформаций не меняется, доля образовавшегося мартенсита отличается максимум на 8%, а доля образовавшегося мартенсита меньше, чем в случае и одноосного растяжения, и простого сдвига. Возможно, основное влияние на наблюдаемые зависимости оказывают процессы разворотов кристаллических решеток зерен и изме-

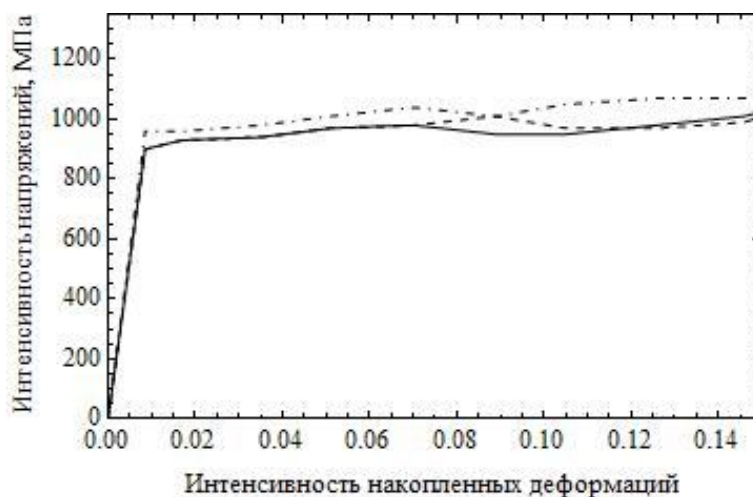


Рис. 2. Кривая «интенсивность напряжений–интенсивность накопленных деформаций» для следующих случаев: растяжение (до интенсивности  $0,068$ ) – сдвиг (—), растяжение (до интенсивности  $0,085$ ) – сдвиг (---), сдвиг (до интенсивности  $0,068$ ) – растяжение (-·-·-)

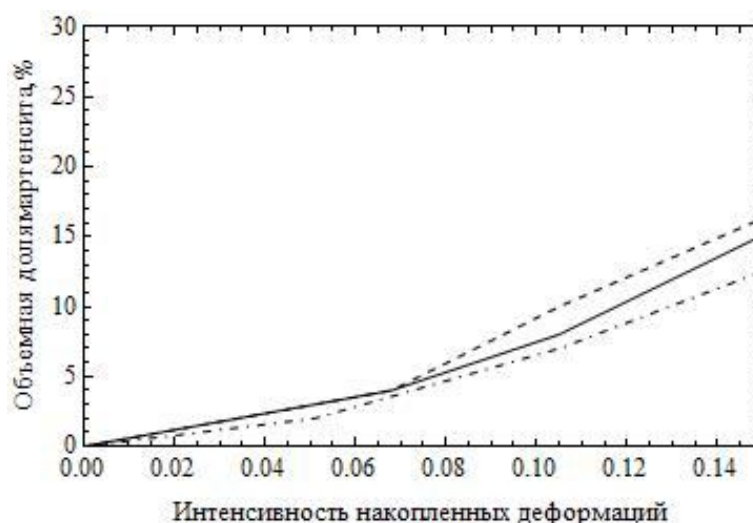


Рис. 3. Зависимость доли образовавшегося мартенсита от интенсивности накопленных деформаций для следующих случаев: растяжение (до интенсивности  $0,068$ ) – сдвиг (—), растяжение (до интенсивности  $0,085$ ) – сдвиг (---), сдвиг (до интенсивности  $0,068$ ) – растяжение (-·-·-)

нение микроструктуры. После излома траектории из-за появившегося изменения микроструктуры материала скольжение по некоторым системам приостанавливается, а вместо них включаются другие.

Проведены серии вычислительных экспериментов, позволяющих моделировать поведение материала и эволюцию микроструктуры под действием температурных и механических воздействий, которые имеют место в технологических

процессах обработки металлов [6, 7, 15, 23–25].

На рис. 4 приведены результаты расчета изменения объемной доли мартенсита при увеличении интенсивности накопленной деформации. Отмечено, что при деформировании до интенсивности накопленных деформаций до  $0,10$  увеличение доли мартенсита происходит за счет появления новых зародышей, а далее – за счет роста уже имеющихся.

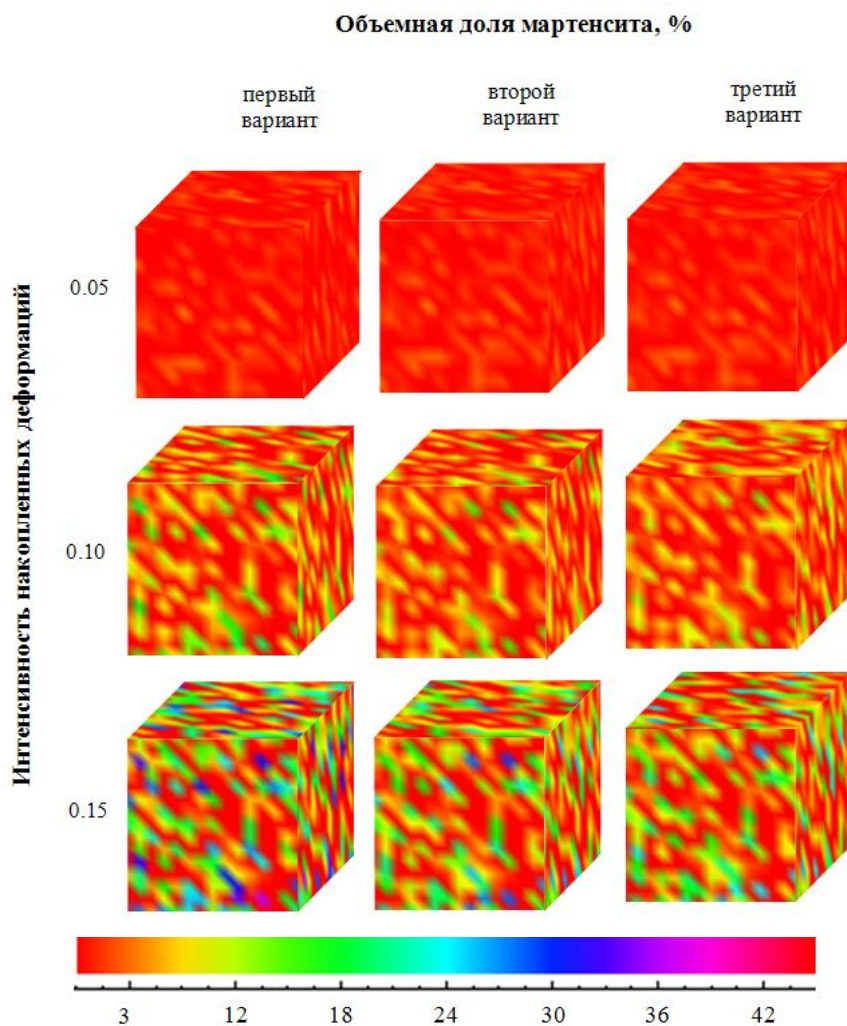


Рис. 4. Распределение объемных долей мартенсита по представительному макрообъему

Полученные расчетные зависимости находятся в хорошем количественном соответствии с экспериментальными данными, известными из литературных данных.

### Заключение

Проект был направлен на построение математической модели для описания процессов неупругого деформирования поликристаллических материалов при термомеханических воздействиях с учетом твердотельных фазовых превращений. Для достижения цели разработаны концептуальные и математические постановки многоуровневой модели, описывающие процессы, происходящие на макро- и мезоуровнях в процессах термомеханической обработки. Модель учитыва-

ет важнейшие механизмы деформирования, реализующиеся в материале в процессе неупругого деформирования, такие как ротация элементов структуры, двойникование, формирование субструктур в процессе деформирования.

Разработаны численные алгоритмы для ЭВМ, реализующие предложенные математические модели, позволяющие проводить вычислительные эксперименты для описания напряженно-деформированного состояния и эволюции внутренней структуры материала поликристалла в процессах термомеханической обработки.

Разработанная модель применена для описания эволюции микроструктуры и фазового состава под действием механической и температурной нагрузок при различных видах нагружения. Кроме то-

го, проведены вычислительные эксперименты по высокотемпературному деформированию титанового сплава, моделирующие процессы динамического возврата и рекристаллизации.

Основные результаты работы изложены в статьях (в журналах, индексируемых

базами Web of Science и Scopus [1–13], в журналах, входящих в рекомендуемый ВАК перечень [14–24], в журналах, входящих в РИНЦ [25]), в трудах и материалах конференций, входящих в РИНЦ, прочих трудах и материалах конференций, тезисах докладов.

#### Библиографический список

1. *Trusov P.V., Shveykin A.I.* Multilevel crystal plasticity models of single- and polycrystals. Statistical models // *Physical Mesomechanics*. – 2013. – Vol. 16. – № 1. – P. 23–33. DOI:10.1134/S1029959913010037.
2. *Исупова И.Л., Трусов П.В.* Математическое моделирование фазовых превращений в сталях при термомеханической нагрузке // *Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика*. – 2013. – № 3. – С. 126–156.
3. *Исупова И.Л., Трусов П.В.* Обзор математических моделей для описания фазовых превращений в сталях // Там же. – С. 157–192.
4. *Мацюк К.В., Трусов П.В.* Модель для описания упруговязкопластического деформирования ГПУ-кристаллов: несимметричные меры напряженно-деформированного состояния, законы упрочнения // *Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета*. – 2013. – № 4. – С. 75–105.
5. *Trusov P.V., Volegov P.S., Yants A.Yu.* Two-scale models of polycrystals: macroscale motion decomposition // *Physical Mesomechanics*. – 2014. – Vol. 17. – № 2. – P. 116–122.
6. *Yanz A.Yu., Trusov P.V., Teplyakova L.A.* Quasi-static loading single crystal specimen of crystal plasticity // *Advanced Materials Research*. – 2014. – Vol. 1040. – P. 571–575.
7. *Trusov P.V., Kondratev N.S.* Crystal plasticity modeling of duplex steels at high temperatures // *Advanced Materials Research*. – 2014. – Vol. 1040. – P. 455–460.
8. *Volegov P.S., Trusov P.V., Shveykin A.I.* Multilevel models of polycrystals using crystal plasticity: investigation of hardening laws influence on the macro effects of cyclic loading // *J. of Physics: Conference Series*, 490 (2014), 012037. DOI: 10.1088/1742-6596/490/1/012037.
9. *Трусов П.В.* О несимметричных мерах напряженного и деформированного состояния и законе Гука // *Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика*. – 2014. – № 2. – С. 220–237.
10. *Трусов П.В., Чечулина Е.А.* Прерывистая текучесть: физические механизмы, экспериментальные данные, макрофеноменологические модели // *Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика*. – 2014. – № 3. – С. 186–232. DOI: 10.15593/perm.mech/2014.3.10.
11. *Няшина Н.Д., Трусов П.В.* Моделирование мартенситных превращений в сталях: кинематика мезоуровня // *Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика*. – 2014. – № 4. – С. 118–151. DOI: 10.15593/perm.mech/2014.4.05.
12. *Volegov P., Trusov P., Gribov D.* Investigation of the features of polycrystals complex loading using a two-level crystal plasticity theory // *IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering*, 71 (2015), 012071. DOI: 10.1088/1757-899X/71/1/012071.
13. *Кондратьев Н.С., Трусов П.В.* Многоуровневые модели пластичности многофазных поликристаллических материалов, основанные на физических теориях пластичности и вязкопластичности // *Вестник ПНИПУ. Механика*. – 2015. – № 1. – С. 76–105. DOI: 10.15593/perm.mech/2015.1.06.
14. *Трусов П.В., Волегов П.С., Янц А.Ю.* Двухуровневые модели поликристаллов: о разложении движения на макроуровне // *Физическая мезомеханика*. – 2013. – Т. 16. – № 5. – С. 17–23.
15. *Исупова И.Л., Трусов П.В.* Двухуровневая модель для описания поведения сталей при термомеханическом нагружении с учетом мартенситных превращений: алгоритм реализации модели // *Вычислительная механика сплошных сред*. – 2013. – Т. 8. – № 4. – С. 491–503.
16. *Трусов П.В., Волегов П.С., Янц А.Ю.* Двухуровневые модели поликристаллов: о независимости образа нагружения представительного макрообъема // *Физическая мезомеханика*. – 2013. – Т. 16. – № 6. – С. 33–41.
17. *Трусов П.В., Волегов П.С., Янц А.Ю.* Двухуровневые модели поликристаллов: приложение к анализу сложного нагружения // *Физическая мезомеханика*. – 2013. – Т. 16. – № 6. – С. 43–50.

18. Трусов П.В., Кондратьев Н.С. Двухуровневая модель для описания неизотермического деформирования двухфазных поликристаллов // Вычислительная механика сплошных сред. – 2014. – Т. 7. – № 2. – С. 181–199.
19. Исупова И.Л., Трусов П.В. Моделирование поведения сталей с учетом диффузионных фазовых превращений // Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. – 2014. – № 1(190). – С. 191–197.
20. Трусов П.В., Исупова И.Л. Построение двухуровневой модели для описания поведения сталей при термомеханическом нагружении в интервале мартенситных превращений // Физическая мезомеханика. – 2014. – Т. 17. – № 2. – С. 5–17.
21. Трусов П.В., Волегов П.С., Янц А.Ю. Двухуровневые модели поликристаллов: приложение к оценке справедливости постулата изотропии Ильющина в случае больших градиентов перемещений // Физическая мезомеханика. – 2015. – Т. 18. – № 1. – С. 23–37.
22. Трусов П.В., Янц А.Ю. О физическом смысле неголономной меры деформации // Физическая мезомеханика. – 2015. – Т. 18. – № 2. – С. 13–21.
23. Волегов П.С., Грибов Д.С., Трусов П.В. Поврежденность и разрушение: обзор экспериментальных работ // Физическая мезомеханика. – 2015 – Т. 18. – № 3. – С. 11–24.
24. Волегов П.С., Грибов Д.С., Трусов П.В. Поврежденность и разрушение: Классические континуальные теории // Физическая мезомеханика. – 2015. – Т. 18. – № 4. – С. 68–87.
25. Няшина Н.Д. Математическая модель деформирования стали при мартенситных переходах // Прикладная математика и вопросы управления. – 2015. – № 1. – С. 36–46.

### **MULTILEVEL MODEL FOR THE DESCRIPTION OF SOLID-STATE PHASE TRANSITIONS IN MULTICOMPONENT ALLOYS**

P.V. Trusov<sup>1</sup>, P.S. Volegov<sup>1</sup>, I.L. Isupova<sup>2</sup>, N.S. Kondratev<sup>3</sup>, E.S. Makarevich<sup>1</sup>,  
N.D. Nyashina<sup>1</sup>, T.V. Ostanina<sup>1</sup>, E.R. Sharifullina<sup>1</sup>, A.I. Shveikin<sup>1</sup>, A.Yu. Yants<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Perm National Research Polytechnic University

<sup>2</sup> Scientific Research Institute of Polymeric Material

<sup>3</sup> Research Institute of Mechanics Lobachevsky State University of Nizhni Novgorod

A three-level model of steel inelastic deformation with allowance for phase transformations under thermomechanical impact has been proposed. Three scale levels: macrolevel I (construction level), macrolevel II (level of representative macrovolume), mesolevel (crystallite level – separate grain or subgrain) have been included in the consideration. The levels are connected by means of internal variables that describe deformation and phase transformations at a deeper level.

A computing algorithm in terms of the statistical approach for representative volume of meso- and macrolevel II on the basis of the formulated mathematical statement has been developed and realized. A parameter identification unit of the hardening law and adequacy check for computing results has been developed.

Computing experiments for representative volume of macrolevel II under deformation by monoaxial stretching, a simple shift and complex loading have been conducted. The dependence of forming martensite on deformation intensity and deformation curves has been received for the specified loading types. The obtained calculated dependences are in good quantitative agreement with the known experimental data from the literature.

The proposed model has been applied to describe the behaviour of a titanic alloy under high-temperature plastic deformation with dynamic recovery and recrystallization. Such processes of mechanical treatment as draft, constrained draft, simple shear have been considered. It is shown that the results of modelling, including the characteristics of the evolving structure, correspond to the experimental data.

*Keywords:* mathematical model, physical plasticity theory, multilevel model, thermo mechanical treatment, solid-state phase transformation.



**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: [trpv@matmod.pstu.ac.ru](mailto:trpv@matmod.pstu.ac.ru)

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

*Исупова Ирина Леонидовна*, кандидат физико-математических наук, инженер I категории, АО «Научно-исследовательский институт полимерных материалов», 614113, г. Пермь, ул. Чистопольская, 16; e-mail: [niipm@perm.ru](mailto:niipm@perm.ru)

*Кондратьев Никита Сергеевич*, младший научный сотрудник, Научно-исследовательский институт механики Национального исследовательского Нижегородского государственного университета им. Н.И. Лобачевского, 603950, г. Нижний Новгород, пр. Гагарина, 23; старший научный сотрудник, ПНИПУ; e-mail: [kondrtevns@gmail.com](mailto:kondrtevns@gmail.com)

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

*Няшина Наталья Дмитриевна*, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры математического моделирования систем и процессов, ПНИПУ; e-mail: [nnd73@perm.ru](mailto:nnd73@perm.ru)

*Останина Татьяна Викторовна*, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры математического моделирования систем и процессов, ПНИПУ; e-mail: [tv-ostanina@yandex.ru](mailto:tv-ostanina@yandex.ru)

*Шарифуллина Эльвира Ривгатовна*, аспирант кафедры математического моделирования систем и процессов, ПНИПУ; e-mail: [Elvira16\\_90@mail.ru](mailto:Elvira16_90@mail.ru)

*Швейкин Алексей Игоревич*, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник кафедры математического моделирования систем и процессов, ПНИПУ; e-mail: [alexey.shveykin@gmail.com](mailto:alexey.shveykin@gmail.com)

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

*Материал поступил в редакцию 21.10.2016 г.*