

На правах рукописи

Шарифуллина Эльвира Ривгатовна

**МНОГОУРОВНЕВАЯ МОДЕЛЬ ДЛЯ ОПИСАНИЯ
СВЕРХПЛАСТИЧЕСКОГО ДЕФОРМИРОВАНИЯ
ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ**

05.13.18 – математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Пермь – 2019

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Пермский национальный исследовательский политехнический университет».

Научный руководитель: **Трусов Петр Валентинович**,
доктор физико-математических наук,
профессор

Официальные оппоненты: **Кривилев Михаил Дмитриевич**,
доктор физико-математических наук,
заведующий учебно-научной лабораторией
«Физика конденсированных сред»
Федерального государственного
бюджетного образовательного учреждения
высшего образования «Удмуртский
государственный университет», г.Ижевск
Романова Варвара Александровна,
доктор физико-математических наук,
ведущий научный сотрудник лаборатории
механики структурно-неоднородных сред
Федерального государственного
бюджетного учреждения науки «Институт
физики прочности и материаловедения
Сибирского отделения Российской академии
наук», г.Томск

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное
учреждение науки «Институт
машиноведения Уральского отделения
Российской академии наук», г.Екатеринбург

Защита диссертации состоится «25» июня 2019 года в 14:00 на заседании диссертационного совета Д 212.188.08, созданного на базе ФГБОУ ВО «Пермский национальный исследовательский политехнический университет», по адресу: 614990, г. Пермь, Комсомольский проспект, 29, ауд. 423б.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке и на сайте ФГБОУ ВО «Пермский национальный исследовательский политехнический университет» (<http://pstu.ru>).

Автореферат разослан «___» _____ 2019 года

Ученый секретарь
диссертационного совета Д.212.188.08,
кандидат физико-математических наук, доцент

А.И. Швейкин

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы исследования и степень ее разработанности.

Для развития промышленных технологий изготовления металлических деталей сложной конфигурации весьма перспективным представляется использование деформирования в режиме сверхпластичности (М.Х.Шоршоров, М.В.Грабский, П.И.Полухин, О.А.Кайбышев, И.Н.Фридляндер, Р.А.Васин, Ф.У.Еникеев, Р.Р.Мулюков, O.D.Sherby, D.Stephen и др.), позволяющем получать детали сложной формы с существенным уменьшением количества сварных соединений (что приводит к снижению уровня остаточных напряжений). При этом происходит снижение числа технологических операций и расхода материала, при деформировании требуются меньшие усилия, приводящие к меньшему износу инструментов. Предметом исследования предлагаемой работы являются процессы деформирования в режиме структурной сверхпластичности, к реализации которого способны практически все металлы и сплавы при соответствующей предварительной подготовке их структуры и осуществлении деформирования в определенных (относительно широких) температурно-скоростных диапазонах воздействий. Объектами исследования выступают поликристаллические металлические сплавы с подготовленной к сверхпластичности структурой.

Для установления рациональных режимов обработки материалов, а также для создания новых технологий с использованием преимуществ сверхпластического деформирования (с учетом резко возросших требований по уменьшению сроков разработки) все более востребованным является применение методов математического моделирования. При разработке моделей для описания процессов изготовления большеразмерных деталей методами неупругого деформирования следует учитывать существенную неоднородность режимов нагружения различных зон исследуемой области. В связи с этим актуальной является задача построения конститутивной модели, которая бы позволила на основе детального учета физических процессов описать поведение материала в относительно широких диапазонах внешних воздействий. Решение этой задачи дает возможность исследования и усовершенствования технологий с использованием одной конститутивной модели материала, что представляется более эффективным по сравнению с использованием (в общем случае достаточно большого числа) отдельных моделей для разных режимов нагружения.

Результаты экспериментов по сверхпластическому деформированию для различных металлов и сплавов (Р.З.Валиев, О.А.Кайбышев, М.М.Мышляев, А.А.Мазилкин, P.Berbon, M.Furukawa, J.C.Huang, R.B.Figueiredo, K.Neishi и др.) даже в случае одноосного растяжения показывают, что в большинстве опытов наблюдается стадийность кривой растяжения, связанная с реализацией разных режимов деформирования: стадия упругопластичности, стадия «перехода» к структурной сверхпластичности, сам режим структурной сверхпластичности и «выход» из него. В экспериментальных

работах описывается значимое изменение роли отдельных механизмов (внутризеренного дислокационного и зернограничного скольжения, ротаций решеток кристаллитов, рекристаллизации) и существенное изменение структуры в процессе испытания. Это подтверждает актуальность решения задачи построения математической модели материала, позволяющей учитывать основные механизмы, их взаимовлияние и изменение значимости их ролей при деформировании, а также структуру материала и ее эволюцию. Следует отметить, что при многоуровневом моделировании одноосное деформирование на макроуровне требует трехмерного описания на нижележащих уровнях. Это позволяет использовать результаты простых (одноосных) испытаний для идентификации и верификации многоуровневых моделей, пригодных для анализа произвольных нагружений.

В настоящее время можно выделить следующие основные подходы к формулировке определяющих соотношений для описания сверхпластического деформирования: 1) макрофеноменологический, 2) структурно-механический, 3) термодинамический, 4) физический. Зачастую модели построены с использованием элементов нескольких подходов, в связи с чем не всегда удается строго отнести их к определенному классу (в этом случае модель условно относится к тому классу, признаки которого преобладают). Наиболее широко применяемыми являются первые три подхода. Описания различных макрофеноменологических и структурно-механических теорий представлены, например, в монографиях М.Х. Шоршорова, М.В. Грабского, И.И. Новикова, А.А. Преснякова, О.А. Кайбышева, Р.А. Васина, Ф.У. Еникеева, Е.Н. Чумаченко, О.М. Смирнова и др., а также в рамках многих других исследований (К.А. Padmanabhan, D.H. Shin, O.D. Sherby, F.A. Mohamed, C.H. Cáceres и др.). Модели в рамках термодинамического подхода предложены в работах О.Б. Наймарка, Л.С. Метлова, Я.И. Рудаева, А.И. Рудского, Д.А. Китаевой, Г.М. Аманбаевой, K.R. Rajagopal и др.

Позже стал развиваться многоуровневый подход, в котором основой является явное описание изменения структуры материала на различных масштабных уровнях. В развитие данного направления значительный вклад внесли отечественные ученые В.А. Лихачев и В.Г. Малинин, А.Е. Волков, В.В. Рыбин, ученые томской научной школы В.Е. Панина, М.Д. Кривилев и другие. В последние десятилетия активно развиваются построенные в рамках данного подхода многоуровневые модели на основе физических теорий пластичности, которые за счет введения внутренних переменных, явным образом характеризующих состояние элементов мезо- и микроструктуры и физические механизмы деформирования на различных масштабных уровнях, позволяют описывать поведение материала в относительно широком диапазоне параметров воздействия. К настоящему моменту существенное развитие получили конститутивные модели, учитывающие внутризеренное дислокационное скольжение, двойникование, ротации решеток кристаллитов.

Обзоры работ данного направления приведены, например, в статьях L.Anand, P.Van Houtte, D.L.McDowell, F.Roters, П.В.Трусова и др.

Важным направлением развития данного класса моделей, наряду с обоснованным с позиций физики твердого тела усовершенствованием описания упомянутых механизмов, является учет других значимых механизмов деформирования, в частности, механизма зернограницного скольжения, являющегося лидирующим в режиме структурной сверхпластичности. Среди работ в этом направлении важно отметить концепцию нелинейной многоуровневой теории пластического деформирования, развиваемой В.Е. Паниным и коллегами (П.В.Макаровым, В.А.Романовой и др.), в рамках которой исследуется роль границ раздела, механизма зернограницного скольжения (в настоящее время ведутся работы и по описанию сверхпластичности). В серии работ А.И. Пшеничнюка, А.П. Жилиева и коллег представлен возможный вариант согласованного описания сверхпластического деформирования на макроуровне (уровне образца) и мезоуровне (уровне зерна) с использованием концепции полос кооперативного зернограницного проскальзывания; рассмотрен также вопрос об определении ресурса сверхпластичности – величины деформаций до разрушения. Однако автору диссертации не встречались многоуровневые модели на основе физических теорий пластичности (в указанном выше смысле), включающие явное описание внутризеренного дислокационного скольжения, ротаций решеток кристаллитов, внутризеренного и зернограницного упрочнения, взаимодействия внутризеренных и зернограницных механизмов деформирования, ориентированные на рассмотрение сверхпластического деформирования.

Таким образом, на основе вышеприведенной информации можно заключить, что создание и использование математических моделей на базе физических теорий пластичности, предназначенных для описания сверхпластического деформирования металлов и сплавов (включая режимы «входа» и «выхода» из сверхпластичности) является весьма актуальной задачей, но находится на начальной стадии своего развития. Одним из важных направлений совершенствования математических моделей представляется создание многоуровневой модели, включающей физически обоснованную формулировку соотношений для описания механизма зернограницного скольжения.

Цель работы – разработка многоуровневой математической модели, учитывающей важнейшие физические механизмы и позволяющей описывать деформирование в режимах обычной пластичности и структурной сверхпластичности, а также переходов между ними.

Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие **основные задачи**:

1. Проанализировать основные механизмы неупругого деформирования (внутризеренное дислокационное и зернограницное скольжение), а также сопутствующие процессы (динамическую рекристаллизацию,

зернограничную диффузию, ротации решеток кристаллитов) при исходных условиях (по структуре материала и температурно-скоростным диапазонам), характерных для структурной сверхпластичности. Разработать сценарий реализации процесса деформирования при одноосном испытании, включающий описание ролей и взаимодействий вышеуказанных механизмов, а также изменения структуры.

2. Обосновать выбор подхода (многоуровневого на основе физических теорий пластичности) к построению математической модели для описания пластического и сверхпластического деформирования поликристаллических металлов и сплавов, включающей явное рассмотрение значимых физических механизмов и изменяющейся структуры материала, позволяющей описывать деформирование в различных режимах и переходы между ними.

3. На базе физической теории упруговязкопластичности поликристаллов разработать модификацию статистической многоуровневой модели, позволяющей описывать процессы внутризеренного и зернограничного упрочнения и разупрочнения (с учетом взаимовлияния механизмов зернограничного скольжения и внутризеренного дислокационного скольжения, изменения их ролей при деформировании, а также действия указанных в п.1 сопутствующих процессов) в температурно-скоростных диапазонах, характерных для структурной сверхпластичности.

4. Разработать алгоритмы решения входящих в математическую постановку систем уравнений с использованием выбранных (с соответствующим обоснованием выбора) численных методов. Создать комплекс программ, позволяющий осуществлять вычислительные эксперименты по произвольным программам нагружения представительного макрообъема.

5. Осуществить идентификацию и верификацию разработанной модифицированной модели с использованием численных экспериментов при различных исходных состояниях зеренной структуры и параметрах термомеханических воздействий для промышленного алюминиевого сплава 1420.

Методология и методы исследования. Методологической основой диссертационной работы являются разработки отечественных и зарубежных ученых в области нелинейной механики и физики деформируемого твердого тела, математического моделирования в механике. Информационную базу составляют монографические работы, справочная литература, материалы научно-технических конференций, статьи в периодических изданиях и научных сборниках по исследуемой проблеме.

Методы исследования основаны на многоуровневом математическом моделировании на базе физических теорий пластичности с введением внутренних переменных, позволяющем явным образом описывать физические механизмы деформирования и структуру материала на различных масштабных уровнях. Разработаны алгоритмы реализации модели

с применением численных методов интегрирования систем обыкновенных дифференциальных уравнений (на языке Fortran).

Научная новизна работы заключается в следующем:

1. Предложена структура модифицированной статистической трехуровневой модели, включающей макроуровень и два структурных уровня для учета механизмов внутризеренного дислокационного и зернограницного скольжения, вышеуказанных сопутствующих процессов, позволяющей описывать неупругое деформирование с переходом к режиму структурной сверхпластичности.

2. Предложен способ описания механизмов зернограницного и внутризеренного дислокационного скольжения в температурно-скоростных диапазонах, характерных для структурной сверхпластичности, с учетом их взаимовлияния и изменения ролей механизмов в процессе деформирования.

3. Разработаны алгоритмы реализации модели с использованием эффективных численных схем. Создан комплекс программ для ЭВМ.

4. Проведен детальный анализ результатов моделирования испытаний образцов из промышленного алюминиевого сплава 1420 с глубоким проникновением в действующие механизмы (их взаимосвязи, изменение ролей в процессе деформирования).

Содержание приведенных выше п.1 и п.2 характеризуют **теоретическую значимость** работы.

Практическая значимость работы заключается в возможности использования разработанной модели и комплекса программ для анализа процессов сверхпластического деформирования материалов в относительно широких температурно-скоростных диапазонах, необходимого для создания новых и совершенствования существующих технологий обработки материалов методами интенсивного деформирования. Получено государственное свидетельство о регистрации программы для ЭВМ №2015663151 от 11.12.2015 [10].

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Трехуровневая математическая модель для описания поведения поликристаллических материалов в широких диапазонах термомеханических воздействий, в том числе:

– математическая модель на основе физической теории упруговязкопластичности, учитывающая описание механизма зернограницного скольжения, а также вышеприведенных (в п.1 перечня основных задач) сопутствующих процессов;

– математическое описание законов внутризеренного дислокационного и зернограницного упрочнения при деформировании с переходом к режиму структурной сверхпластичности.

2. Алгоритмы, используемые при решении систем уравнений разработанной модели.

3. Комплекс программ, с помощью которого реализуется предлагаемая математическая модель.

4. Результаты моделирования и их сопоставление с данными натурных испытаний промышленного алюминиевого сплава 1420 при различных температурно-скоростных условиях.

Достоверность и обоснованность результатов подтверждается удовлетворительным соответствием результатов численного моделирования экспериментальным данным по одноосному нагружению алюминиевого сплава 1420, результатами численных экспериментов по устойчивости и сходимости решения.

Апробация работы. Результаты диссертационной работы докладывались на конференциях: XXIII–XXVII Всероссийских школах-конференциях молодых ученых «Математическое моделирование в естественных науках» (Пермь, ПНИПУ, 2014–2018); VIII Российской научно-технической конференции «Механика, ресурс и диагностика материалов и конструкций» (Екатеринбург, 2014); международной конференции «Перспективные материалы с иерархической структурой для новых технологий и надежных конструкций» (Томск, 2015); международной конференции с элементами научной школы для молодежи «Современные технологии и материалы новых поколений» (Томск, 2017); XX и XXI Зимних школах-конференциях по механике сплошных сред (Пермь, 2017, 2019); XII международной конференции «Механика, ресурс и диагностика материалов и конструкций» (Екатеринбург, 2018). Работа полностью докладывалась и обсуждалась на семинарах кафедры математического моделирования систем и процессов ПНИПУ (руководитель – д.ф.-м.н., проф. П.В. Трусов), Института механики сплошных сред УрО РАН (руководитель – академик РАН, д.т.н., проф. В.П. Матвеев), кафедры композиционных материалов и конструкций ПНИПУ (руководитель – д.т.н., проф. А.Н. Аношкин).

Публикации. Результаты исследования по теме диссертации отражены в 21 публикации, из них 4 – в ведущих научных журналах, рекомендованных ВАК для публикации материалов диссертаций, 1 статья – в журнале, индексируемом в базе данных Scopus, 4 статьи – в сборниках материалов конференций, индексируемых в международных базах цитирования Scopus и/или Web of Science; получено свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ.

Личный вклад автора.

Все результаты, представленные в диссертационной работе, получены при личном участии автора: постановка задачи (совместно с научным руководителем), построение математической модели, разработка алгоритма и программы реализации модели; численные эксперименты и анализ результатов выполнены автором лично.

Структура и объем работы. Диссертационная работа состоит из введения, списка сокращений и основных обозначений, четырех глав, заключения, списка использованной литературы. Работа изложена на 149 страницах, содержит 28 рисунков. Список литературы включает 218 наименований.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Введение содержит обоснование актуальности выбранной темы исследования и характеристику степени ее разработанности. Сформулированы цель и задачи работы. Освещены научная новизна, теоретическая и практическая значимость работы, подходы и методы исследования, положения, выносимые на защиту. Приведена информация о степени достоверности и об апробации результатов. Представлено краткое изложение диссертационной работы по главам.

Первая глава посвящена обзору публикаций по выбранной тематике работы.

В п.1.1 содержится обзор результатов экспериментальных исследований сверхпластического деформирования образцов из различных металлов и сплавов с анализом особенностей испытаний на структурную сверхпластичность и ее проявлений, а также механизмов деформирования и эволюции структуры материала.

В п.1.2 рассмотрены существующие подходы, методы, модели для исследования сверхпластического деформирования поликристаллических материалов. Приведен обзор моделей, посвященных описанию сверхпластического деформирования и построенных в рамках различных подходов к формулировке определяющих соотношений – макрофеноменологического, структурно-механического, термодинамического, физического. Обзор работ показал, что последний подход для построения моделей, ориентированных на описание сверхпластического деформирования, представляется наиболее перспективным, однако в настоящее время находится на начальном этапе своего развития. В связи с этим особое внимание уделяется методам многоуровневого моделирования неупругого деформирования на основе физических теорий пластичности.

Во **второй главе** рассмотрены проблемы построения математической модели для описания сверхпластического деформирования представительного макрообъема поликристалла с учетом ключевых механизмов и изменения структуры.

В п.2.1 приведена концептуальная постановка задачи (основные гипотезы, требования и ограничения при разработке конститутивной модели) и общая структура модели, включающая определяющие соотношения, эволюционные и замыкающие уравнения.

В п.2.2 представлена математическая постановка, содержащая соотношения моделей макроуровня, структурного уровня для описания зернограницного скольжения и мезоуровня; рассмотрен вопрос о согласовании определяющих соотношений соседних масштабных уровней.

В предлагаемой трехуровневой модели характеристиками процессов являются не только мера напряженного состояния (и ее объективная скорость изменения) и мера скорости деформирования, но также температура и

внутренние переменные, определяющие состояние зеренной и дефектной структуры, важные для описания перехода к режиму сверхпластичности.

На макро- и мезоуровнях в качестве основного определяющего соотношения используется закон Гука в скоростной релаксационной форме, сформулированный в терминах текущей конфигурации (все величины макроуровня обозначены заглавными буквами, мезоуровня – строчными):

$$\mathbf{K}^{\text{cor}} \equiv \dot{\mathbf{K}} - \bar{\mathbf{\Omega}} \cdot \mathbf{K} + \mathbf{K} \cdot \bar{\mathbf{\Omega}} = \bar{\mathbf{P}} : (\hat{\nabla} \mathbf{V}^T - \bar{\mathbf{\Omega}} - \mathbf{Z}_{\text{gb}}^{\text{in}} - \mathbf{Z}_{\text{s}}^{\text{in}} - \mathbf{Z}^{\text{th}}). \quad (1)$$

Объективная скорость изменения меры напряженного состояния определяется с помощью коротационной производной $\mathbf{K}^{\text{cor}} \equiv \dot{\mathbf{K}} - \bar{\mathbf{\Omega}} \cdot \mathbf{K} + \mathbf{K} \cdot \bar{\mathbf{\Omega}}$ (на макроуровне) и $\mathbf{k}^{\text{cor}} \equiv \dot{\mathbf{k}} - \bar{\mathbf{\omega}} \cdot \mathbf{k} + \mathbf{k} \cdot \bar{\mathbf{\omega}}$ (на мезоуровне – для каждого кристаллита, индекс кристаллита опущен), где $\mathbf{K}$ и $\mathbf{k}$ – взвешенный тензор напряжений Кирхгоффа макро- и мезоуровня соответственно, $\bar{\mathbf{\Omega}}$ – тензор спина квазитвердого движения макроуровня, $\bar{\mathbf{\omega}}$ – тензор спина квазитвердого движения элемента мезоуровня. Тензоры $\bar{\mathbf{\Omega}}$ и $\bar{\mathbf{\omega}}$ определяют скорости поворота соответствующих подвижных систем координат, относительно которых вычисляется (собственно) деформационное движение.

В качестве меры скорости полных деформаций на макроуровне используется индифферентный тензор $\mathbf{Z} \equiv \hat{\nabla} \mathbf{V}^T - \bar{\mathbf{\Omega}}$ (на мезоуровне $\mathbf{z} \equiv \hat{\nabla} \mathbf{v}^T - \bar{\mathbf{\omega}}$), определенный как транспонированный градиент скорости перемещений за вычетом соответствующего спина, $\hat{\nabla}$ – набла–оператор в текущей лагранжевой системе координат.

Принимается гипотеза об аддитивности упругих (индекс e), неупругих (индекс in) и термических (индекс th) составляющих меры скорости полных деформаций: $\mathbf{Z} = \mathbf{Z}^e + \mathbf{Z}^{\text{in}} + \mathbf{Z}^{\text{th}}$ (на макроуровне), $\mathbf{z} = \mathbf{z}^e + \mathbf{z}^{\text{in}} + \mathbf{z}^{\text{th}}$ (на мезоуровне). На макроуровне $\mathbf{Z}^{\text{in}}$ включает две составляющие: неупругую за счет зернограничного скольжения $\mathbf{Z}_{\text{gb}}^{\text{in}}$ и внутризеренного дислокационного скольжения $\mathbf{Z}_{\text{s}}^{\text{in}}$.

Значения внутренних переменных макроуровня ($\bar{\mathbf{\Omega}}, \bar{\mathbf{P}}, \mathbf{Z}_{\text{gb}}^{\text{in}}, \mathbf{Z}_{\text{s}}^{\text{in}}, \mathbf{Z}^{\text{th}}$) определяются с использованием соотношений низших уровней. Переменные $\bar{\mathbf{\Omega}}$ и $\bar{\mathbf{P}}$ устанавливаются осреднением по представительному макрообъему по данным, полученным с помощью модели мезоуровня. Для определения неупругой составляющей за счет зернограничного скольжения $\mathbf{Z}_{\text{gb}}^{\text{in}}$ используются соотношения соответствующего структурного уровня для описания зернограничного скольжения. Неупругая составляющая за счет внутризеренных сдвигов $\mathbf{Z}_{\text{s}}^{\text{in}}$ и термическая составляющая скорости деформации $\mathbf{Z}^{\text{th}}$ определяются из модели мезоуровня с использованием процедуры согласования определяющих соотношений макроуровня и мезоуровня. Также в качестве отклика представительного макрообъема определяется мощность теплового источника с помощью осреднения

мощностей совокупности внутренних тепловых источников за счет внутризеренного скольжения и зернограницного скольжения.

При формулировке соотношений структурного уровня для описания зернограницного скольжения полагается, что граница каждого кристаллита представляет собой множество плоских фасеток с нулевой толщиной, каждая пара соседних кристаллитов в представительном макрообъеме имеет общую фасетку границы, относительные смещения кристаллитов происходят по общей фасетке путем перемещения в них зернограницных дислокаций (однако – без явного введения носителей данного механизма). При построении модели осуществляется переход от смещений к деформационным характеристикам: при описании зернограницного скольжения смещение или совокупность смещений (скоростей смещений) двух кристаллитов относительно друг друга вдоль общей границы аппроксимируется сдвигом (скоростью сдвига), осредненным на представительный макрообъем (по аналогии с установлением соотношения для скорости сдвига в кристаллите за счет внутризеренного дислокационного скольжения (уравнения Орована)).

Неупругая составляющая $\mathbf{Z}_{gb}^{in}$ меры скорости деформации определяется соотношением $\mathbf{Z}_{gb}^{in} = \sum_{i=1}^{4K_{gb}} \dot{\gamma}_{gb}^{(i)} \mathbf{b}_{gb}^{(i)} \mathbf{n}_{gb}^{(i)}$, где $\mathbf{n}_{gb}^{(i)}$ – нормаль к плоскости фасетки границы, $\mathbf{b}_{gb}^{(1)}$ и $\mathbf{b}_{gb}^{(2)}$ – взаимно ортогональные единичные векторы направлений смещения в плоскости фасетки (в начальный момент времени один из векторов направления смещения привязывается к решетке одного из кристаллитов), $4K_{gb}$ – общее количество базисных направлений смещения по всем фасеткам границ в представительном объеме макроуровня.

Соотношение для скоростей зернограницных сдвигов $\dot{\gamma}_{gb}^{(i)}$ записывается в виде:

$$\dot{\gamma}_{gb}^{(i)} = \dot{\gamma}_{gb0}^{(i)} \left(\tau_{gb}^{(i)} / \tau_{cgb}^{(i)} \right)^n H(\tau_{gb}^{(i)} - \tau_{cgb}^{(i)}), \quad i = 1, \dots, 4K_{gb} \quad (2)$$

где $\dot{\gamma}_{gb0}^{(i)}$ – параметр модели, зависящий от площади рассматриваемой границы, интенсивности скорости деформации и размера зерна, $\tau_{gb}^{(i)}$ и $\tau_{cgb}^{(i)}$ – касательные и критические сдвиговые напряжения, H – функция Хевисайда, n – параметр модели. В модели явно описывается имеющая место смена соседних кристаллитов, в связи с чем касательные напряжения $\tau_{gb}^{(i)}$, аффилированные с границей, определяются осреднением напряжений мезоуровня в составляющих границу зернах (как исходных, так и надвигающихся) с учетом величины осуществленного к текущему моменту сдвига и характерного для данной границы предельного значения сдвига перед полной потерей контакта исходно составлявших границу зерен. Эволюционное соотношение для критических напряжений $\tau_{cgb}^{(i)}$ подробно рассматривается в главе 3.

В модели мезоуровня описывается поведение отдельных кристаллитов. На данный уровень передаются кинематические воздействия с макроуровня с учетом реализации части воздействий за счет механизма зернограницного скольжения $\hat{\nabla} \mathbf{v}^T = \hat{\nabla} \mathbf{V}^T - \mathbf{Z}_{gb}^{in}$. Помимо кинематического воздействия на мезоуровень также передается температура θ и скорость изменения температуры $\dot{\theta}$ (все воздействия на макроуровне определяются из решения краевой задачи на уровне конструкции).

Неупругая составляющая меры скорости деформации на мезоуровне определяется как $\mathbf{z}_s^{in} = \sum_{i=1}^K \dot{\gamma}^{(i)} \mathbf{b}^{(i)} \mathbf{n}^{(i)}$, где $\mathbf{b}^{(i)}$ и $\mathbf{n}^{(i)}$ – единичные векторы направления скольжения и нормали к плоскостям скольжения i -й системы скольжения в текущей конфигурации, K – количество систем скольжения.

Скорости внутризеренных сдвигов $\dot{\gamma}^{(i)}$ определяются вязкопластическим соотношением:

$$\dot{\gamma}^{(i)} = \dot{\gamma}_0 \left(\tau^{(i)} / \tau_c^{(i)} \right)^m H(\tau^{(i)} - \tau_c^{(i)}), \quad i = 1, \dots, K, \quad (3)$$

где $\dot{\gamma}_0$ – параметр модели (характеризует скорость сдвигов при равенстве касательных напряжений критическим), $\tau^{(i)}$ – касательные сдвиговые напряжения (определяются как $\tau^{(i)} = \mathbf{b}^{(i)} \mathbf{n}^{(i)} : \boldsymbol{\kappa}$), m – параметр модели. Эволюционное соотношение для критических сдвиговых напряжений $\tau_c^{(i)}$ подробно рассматривается в главе 3.

На мезоуровне также определяется термическая составляющая $\mathbf{z}^{th} = \boldsymbol{\alpha} \dot{\theta}$ ($\boldsymbol{\alpha}$ – тензор термического расширения) и удельная (на единицу массы) мощность внутреннего теплового источника $q = \alpha \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{z}_s^{in} / \hat{\rho}$ (α – коэффициент выхода тепла, $\hat{\rho}$ – плотность материала кристаллита в текущей конфигурации).

Для определения спина $\bar{\boldsymbol{\omega}}$ используется модель ротации¹, согласно которой подвижная система координат связывается с элементами симметрии кристаллитов, что обуславливает соответствующий выбор коротационной производной.

При активизации зернограницного скольжения по нескольким границам зерна появляется возможность его дополнительного поворота за счет действия сдвиговых напряжений по границам. Для описания последнего к спину добавляется составляющая $\bar{\boldsymbol{\omega}}_{gb} = \dot{\gamma}_{gb0} b \boldsymbol{\mu}_\tau H \left(\left\| \left\langle \mathbf{z}_{gb}^{in} \right\rangle_{grain} \right\| \right)$, где b – параметр модели (характеризует податливость по отношению к моментным воздействиям), $\boldsymbol{\mu}_\tau$ – момент за счет действия касательных усилий на всех границах зерна, $\left\langle \mathbf{z}_{gb}^{in} \right\rangle_{grain}$ – средняя скорость деформации за счет скольжения

¹ Трусов П.В., Швейкин А.И., Янц А.Ю. О разложении движения, независимых от выбора системы отсчета производных и определяющих соотношениях при больших градиентах перемещений: взгляд с позиций многоуровневого моделирования // Физическая мезомеханика. – 2016. – Т. 19, № 2. – С. 47-65.

по границам зерна ($\langle \rangle_{grain}$ – осреднение по всем границам текущего зерна), норма тензора второго ранга $\mathbf{T}$ определена как $\|\mathbf{T}\| = \sqrt{\mathbf{T}:\mathbf{T}^T}$, функция Хевисайда $H(\cdot)$ здесь выступает в роли индикаторной для дополнительного вращения зерна за счет сдвиговых напряжений по границам.

В третьей главе приведено описание модифицированных законов упрочнения для внутризеренного дислокационного и зернограницного скольжения, позволяющих отразить взаимовлияние механизмов и изменение их ролей в процессе сверхпластического деформирования.

В начале главы на основе анализа экспериментальных данных, приведенном в главе 1, описан предлагаемый «сценарий», реализующийся во время испытания с переходом в режим структурной сверхпластичности (в предположении введенных в главе 2 ограничений, в частности, при температуре испытания, не превышающей 0.6–0.7 гомологической для исключения необходимости рассмотрения возможной непрерывной динамической рекристаллизации как одного из основных механизмов сверхпластичности). На начальном этапе деформирования (на восходящем участке кривой растяжения) наблюдается упрочнение и преобладающее действие механизмов внутризеренного дислокационного скольжения и ротаций зерен (происходит развитие кристаллографической текстуры), зернограницное скольжение малозначимо. На переходной стадии (кривая растяжения постепенно изгибается и может демонстрировать стадию либо со стабильным напряжением течения, либо с его постепенным снижением) происходит возрастание роли зернограницного скольжения, для реализации которого границы к этому моменту становятся более подготовленными за счет притока решеточных дислокаций и выглаживания посредством зернограницной диффузии. В зависимости от исходной структуры материала и температурно-скоростных условий испытания либо на начальном этапе, либо на переходной стадии реализуется динамическая рекристаллизация, в ходе которой происходит снижение плотности дислокаций, рост среднего размера зерен и возвращение их вытянутой формы, полученной на первой стадии, к равноосной. Режим структурной сверхпластичности (стадия на кривой со стабильным напряжением течения или с его постепенным снижением) можно охарактеризовать преобладанием зернограницного скольжения, сопровождающегося аккомодационными механизмами внутризеренного дислокационного скольжения и зернограницной диффузии, ротациями и активной сменой соседних зерен; при этом имеет место стабильность структуры (все зерна остаются практически неизменными, структура – равноосной мелкозернистой).

В п.3.1 приведено описание эволюционного соотношения для критических напряжений внутризеренных сдвигов в виде:

$$\dot{\tau}_c^{(k)} = \dot{\tau}_{st}^{(k)} + \dot{\tau}_b^{(k)}, \quad (4)$$

предполагающем, что критические напряжения могут изменяться как за счет барьеров дислокационной природы внутри зерна $\dot{\tau}_{st}^{(k)}$, так и за счет влияния границ кристаллитов $\dot{\tau}_b^{(k)}$. Для исходно рекристаллизованных зерен первой составляющей можно пренебречь, поскольку плотность дефектов в них мала и при внутризеренном дислокационном скольжении практически не возникают дополнительные препятствия. Для нерекристаллизованных зерен используется известный закон упрочнения в следующей модифицированной форме:

$$\dot{\tau}_{st}^{(k)} = \sum_{l=1}^K h^{(kl)} \dot{\gamma}^{(l)} - A \left(\exp[\tau_c^{(k)} / \bar{\tau}] - 1 \right) \exp\left(-\frac{U}{k\theta}\right), \quad (5)$$

$$h^{(kl)} = \left[q_{lat} + (1 - q_{lat}) \delta^{(kl)} \right] h^{(l)}, \quad h^{(l)} = h_0 \left| 1 - \tau_c^{(l)} / \tau_{sat} \right|^a,$$

где $h^{(kl)}$ – матрица упрочнения, параметр латентного упрочнения q_{lat} принимает значение 1.0 для компланарных и 1.4 – для некомпланарных систем скольжения (с номерами k и l), $\delta^{(kl)}$ – дельта Кронекера, $h^{(l)}$ характеризует деформационное упрочнение, k – постоянная Больцмана, τ_{sat} , a , A , U , $\bar{\tau}$ – параметры модели. Первое слагаемое в (5) описывает упрочнение (деформационное и латентное) при внутризеренном дислокационном скольжении. Второе слагаемое в (5), сформулированное с использованием закона аррениусовского типа, описывает влияние диффузионных процессов на сопротивление внутризеренному скольжению – при увеличении температуры и уменьшении скорости деформации повышается как вероятность преодоления барьеров движущимися дислокациями, так и вероятность распада барьеров. Используется приближение для учета снижения скорости упрочнения при уменьшении скорости деформации – за счет введения параметра $h_0 = h_{fixD} (D_0 / D_{0fix})^p$, где h_{fixD} – значение параметра, определяемое при идентификации модели при некоторой фиксированной начальной скорости деформации D_{0fix} , D_0 – начальная скорость деформации в испытаниях с постоянной скоростью движения захватов, p – дополнительный параметр модели (определяется из сопоставления максимальных напряжений в испытаниях при двух скоростях деформации).

Для описания изменения критических напряжений внутризеренных сдвигов за счет границ кристаллитов предлагается модифицированное соотношение в следующем виде:

$$\dot{\tau}_b^{(k)} = \begin{cases} \left[\left(\left\| \mathbf{z}_s^{in} \right\| - \left\| \left\langle \mathbf{z}_{gb}^{in} \right\rangle_{grain} \right\| \right) / \left\| \mathbf{z}_s^{in} \right\| \right] \dot{\tau}_b^{(k)} \text{ [без ЗГС]}, & \text{если } \left\| \mathbf{z}_s^{in} \right\| \geq \left\| \left\langle \mathbf{z}_{gb}^{in} \right\rangle_{grain} \right\|, \\ -\alpha \left[\left(\left\| \left\langle \mathbf{z}_{gb}^{in} \right\rangle_{grain} \right\| - \left\| \mathbf{z}_s^{in} \right\| \right) / \left\| \mathbf{z}_s^{in} \right\| \right] \tau_b^{(k)}, & \text{если } \left\| \mathbf{z}_s^{in} \right\| < \left\| \left\langle \mathbf{z}_{gb}^{in} \right\rangle_{grain} \right\|, \end{cases} \quad (6)$$

где $\|\mathbf{z}_s^{\text{in}}\|$ – норма скорости деформации кристаллита за счет внутризеренного дислокационного скольжения, $\dot{\tau}_b^{(k)} [\sigma_{\text{ез ЗГС}}]$ – скорость изменения критических напряжений без учета зернограницного скольжения, включающая зависимость от текущего размера зерна, $\tau_b^{(k)}$ – критическое напряжение, характеризующее текущую плотность дефектов в границе, $\alpha > 0$ – параметр модели. Границы зерен в общем случае выступают в роли барьеров, что приводит к зернограницному упрочнению (попадающие в границы решеточные дислокации оставляют в них дислокации ориентационного несоответствия, происходит накопление последних). При активации зернограницного скольжения часть образующихся дислокаций ориентационного несоответствия диссоциирует в зернограницные дислокации, что может, в зависимости от соотношения скоростей внутризеренного и зернограницного скольжения, приводить как к ослаблению зернограницного упрочнения, так и к разупрочнению

В п.3.2 приводится описание эволюционного соотношения для критических напряжений зернограницных сдвигов (для каждого направления смещения в фасетке границы, индекс направления опущен) в виде:

$$\dot{\tau}_{cgb} = f_1 + f_2 + f_3 + f_4. \quad (7)$$

В соотношении (7) первое слагаемое f_1 описывает повышение критических напряжений за счет сопротивления со стороны соседних (в направлении сдвига) зерен и за счет действия процесса динамической рекристаллизации. Предлагается соотношение в виде:

$$f_1 = h \dot{\gamma}_{gb}, \quad (8)$$

где h – коэффициент упрочнения, зависящий от среднего размера кристаллитов и их формы (средней характеристики вытянутости). В результате динамической рекристаллизации средний размер зерен увеличивается, при этом их форма (вытянутая за счет действия внутризеренного дислокационного скольжения на начальной стадии деформирования) вновь становится близкой к равноосной. Сопротивление такой структуры зернограницному скольжению становится существенно меньшим, чем сопротивление начальной структуры. Кроме того, на начальных стадиях при рекристаллизации происходит выход растворенных частиц на границы зерен, что дает вклад в рост сопротивления зернограницному скольжению, на финальной стадии этот процесс прекращается.

Второе слагаемое f_2 характеризует понижение критических напряжений зернограницного сдвига за счет механического выглаживания, которое является следствием контактного взаимодействия граничащих кристаллитов:

$$f_2 = -\beta \sigma_{nn} \sum_{k=1}^4 |\dot{\gamma}_{gb}^{(k)}| H(\sigma_{nn}) + \phi |\sigma_{\tau}| (\gamma_{\max} - \gamma_{gb}), \quad (9)$$

где $\sigma_{nn} = -\mathbf{n}_{gb} \cdot \boldsymbol{\sigma}_{gb} \cdot \mathbf{n}_{gb}$ – давление на границе, σ_τ – тангенциальная составляющая вектора напряжений на границе, β , ϕ – параметры модели. В (9) полагается, что выглаживание происходит при реализации сдвига в каком-либо направлении в границе при положительном давлении, а также за счет уменьшения шероховатости от сдвигов на микроуровне.

Третье слагаемое f_3 описывает понижение критических напряжений за счет повышения энергии границ в результате притока решеточных дислокаций:

$$f_3 = - \sum_{j=1}^4 \sum_{k=1}^{K_j} \mu_j g \dot{\gamma}^{(k)(j)} (\mathbf{b}^{(k)(j)} \cdot \mathbf{N}^{(j)}) H(\mathbf{b}^{(k)(j)} \cdot \mathbf{N}^{(j)}), \quad (10)$$

где j – индекс номера кристаллита, прилегающего к границе, μ_j – весовой коэффициент, учитывающий приток дислокаций из начально составляющих границу зерен и сменяемых их зерен, $\dot{\gamma}^{(k)(j)}$ – скорость сдвига по системе скольжения k в j -м кристаллите (одном из четырех, прилегающих к фасетке), K_j – число систем скольжения в j -м зерне, $\mathbf{b}^{(k)(j)}$ – единичный вектор направления скольжения k в j -м кристаллите, $\mathbf{N}^{(j)}$ – внешняя нормаль к плоскости фасетки границы для j -го кристаллита, g – параметр модели.

Четвертое слагаемое f_4 характеризует понижение критических напряжений в результате сглаживания границ за счет диффузионных процессов, облегчения процессов диссоциации накопленных в границе дислокаций ориентационного несоответствия на зернограницные дислокации, переползания дислокаций:

$$f_4^{(i)} = - c \exp\left(-\frac{U_d}{k\theta}\right) |\sigma_{bb} / \bar{\sigma}|^q, \quad (11)$$

где $\sigma_{bb} = |\mathbf{b}_{gb}^{(i)} \cdot \boldsymbol{\sigma}_{gb} \cdot \mathbf{b}_{gb}^{(i)}|$ – нормальное напряжение в направлении сдвига по границе $\mathbf{b}_{gb}^{(i)}$ (на площадке, ортогональной $\mathbf{b}_{gb}^{(i)}$), вычисляемое по характерным напряжениям $\boldsymbol{\sigma}_{gb}$ для рассматриваемой границы, U_d – энергия активации зернограницной диффузии, $\bar{\sigma}$, c , q – параметры модели.

В п.3.3 представлена полная система уравнений трехуровневой модели. В наиболее общей постановке конститутивная модель должна быть дополнена уравнениями для параметров, характеризующих текущую форму зерен; формулировка этих соотношений с учетом процесса динамической рекристаллизации является достаточно сложной задачей, выходящей за рамки предлагаемой работы. Предложенная формулировка была апробирована для случая испытаний образцов из промышленного алюминиевого сплава 1420 с переходом к режиму структурной сверхпластичности, информация об изменении зеренной структуры во время которых известна и была заложена напрямую в конститутивную модель. Можно отметить, что важнейшей задачей являлась разработка общей

структуры модели, включающей все ключевые физические механизмы деформирования и учитывающей их взаимодействия; в рамках этой структуры конкретные соотношения могут быть модифицированы на основе привлечения более подробной информации из физики твердого тела и экспериментальных данных.

В четвертой главе предложены алгоритмы реализации трехуровневой конститутивной модели материала, приведены результаты по идентификации и верификации модели, а также некоторые другие результаты моделирования с их детальным анализом.

В п.4.1 представлен алгоритм реализации трехуровневой модели и рассмотрен вопрос выбора численных методов для решения задачи.

В п.4.2 приведены результаты по идентификации и верификации модели сверхпластического деформирования.

На рис.1 представлены экспериментальные и полученные с помощью предлагаемой модели кривые одноосного растяжения образцов из алюминиевого сплава 1420. Для определения материальных параметров и проверки модели рассмотрены эксперименты при двух различных скоростях деформирования: кривая, полученная при скорости деформирования 10^{-3} с^{-1} , использовалась для идентификации модели, при 10^{-2} с^{-1} – для ее верификации.

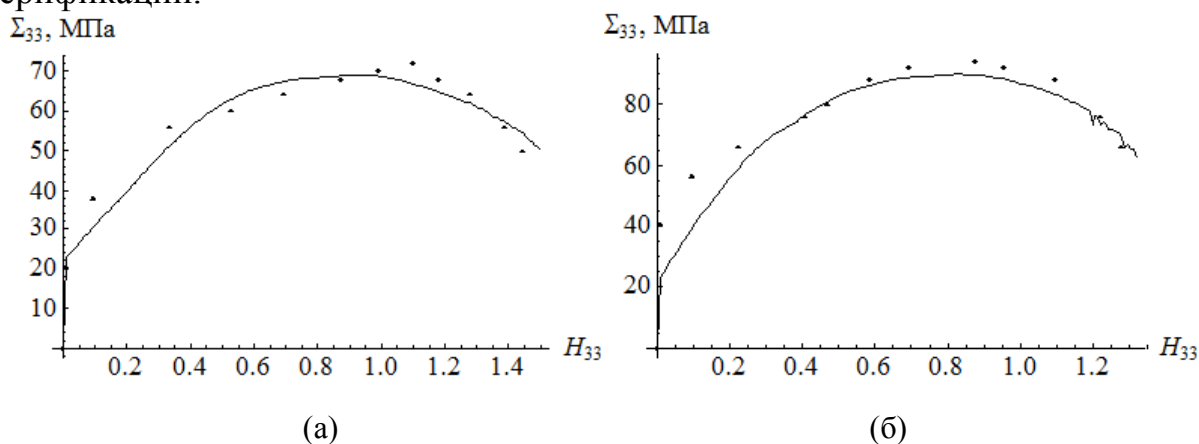


Рис.1. Зависимости интенсивности напряжений $\Sigma_u = \Sigma_{33}$ от H_{33} , полученные при моделировании и в натурных испытаниях (обозначены точками) на растяжение образцов из сплава 1420 (Al-5.5%Mg-2.2%Li-0.12%Zr) при гомологической температуре 0.56:

а) при начальной скорости деформации $D_0 = 10^{-3} \text{ с}^{-1}$, б) при $D_0 = 10^{-2} \text{ с}^{-1}$

Результаты на рис.2 свидетельствуют об увеличении роли зернограницного скольжения.

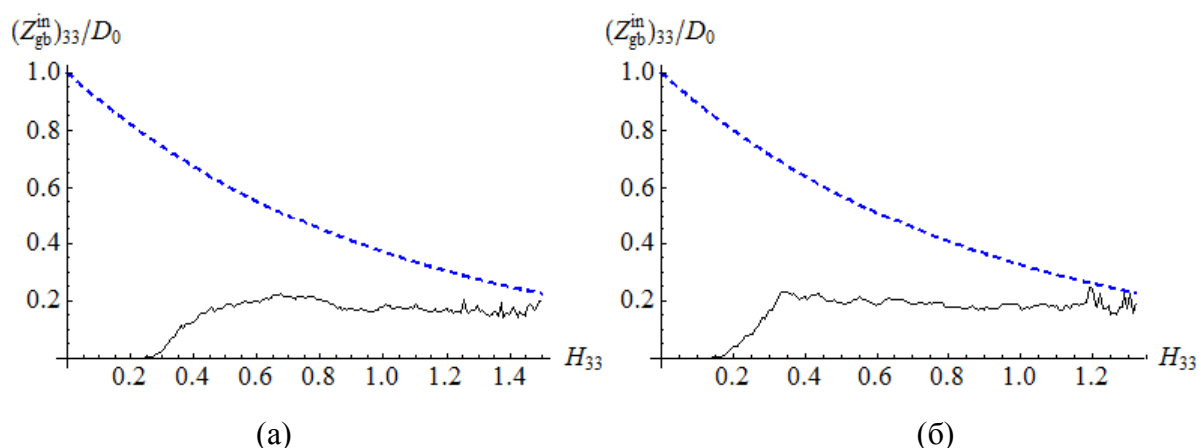


Рис.2. Значения компонент скорости неупругой деформации за счет зернограницного скольжения $(Z_{gb}^{in})_{33}$, выведенные через равные промежутки деформации H_{33} :
а) при начальной скорости деформации $D_0 = 10^{-3} \text{ с}^{-1}$, б) при $D_0 = 10^{-2} \text{ с}^{-1}$ (штрихованной линией обозначена падающая скорость полной деформации D_{33})

Построенные полюсные фигуры на рис.3 подтверждают доминирование внутризеренного дислокационного скольжения на первой стадии (приводящего к текстуре, близкой к текстуре растяжения), на завершающей стадии при лидирующем зернограницном скольжении происходит «размывание» текстуры.

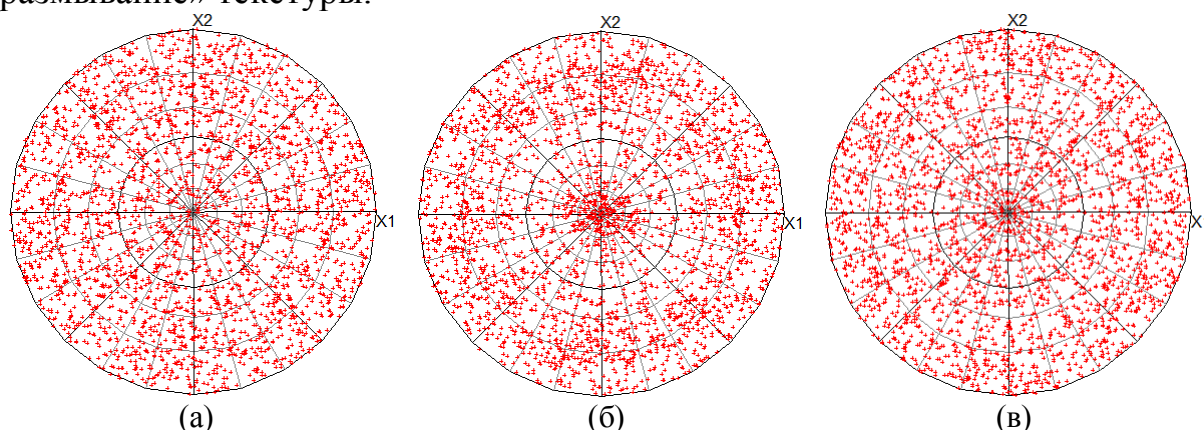


Рис. 3. Прямые полюсные фигуры для направлений $\langle 111 \rangle$ (проецирование с оси OX_3):
а) в начальный момент времени для всех нагружений, б) после растяжения до $H_{33}=0.9$,
в) после растяжения до $H_{33}=1.3$

Все результаты находятся в удовлетворительном соответствии с экспериментальными данными.

В п.4.3 представлены результаты моделирования для других видов нагружения (сжатия, простого сдвига) для образцов из сплава 1420 с идентифицированными и верифицированными параметрами в п.4.2. Проведен анализ полученных результатов расчетов, показано, что они согласуются с механическими и физическими соображениями.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Проведен обзор экспериментальных исследований по сверхпластическому деформированию образцов из различных металлов и сплавов: проанализированы основные особенности испытаний на структурную сверхпластичность и ее проявления, а также механизмы деформирования и изменения структуры материала. Разработан сценарий реализации процесса деформирования при одноосном испытании, включающий описание ролей и взаимодействий механизмов, а также изменения структуры.

2. Проведен обзор моделей, используемых для описания сверхпластического деформирования металлов и сплавов: определено актуальное направление развития имеющихся математических моделей.

3. Обоснован выбор подхода (многоуровневого на основе физических теорий пластичности) к построению математической модели для описания пластического и сверхпластического деформирования поликристаллических металлов и сплавов, включающей явное рассмотрение значимых физических механизмов и изменяющейся структуры материала, позволяющей описывать деформирование в различных режимах и переходы между ними.

4. Предложена трехуровневая модель на основе физической теории упруговязкопластичности, учитывающая механизм зернограницного скольжения. Предложено математическое описание законов внутризеренного дислокационного и зернограницного упрочнения при деформировании с переходом в режим структурной сверхпластичности.

5. Разработаны алгоритмы реализации модели.

6. Создан комплекс программ, реализующих алгоритмы разработанной трехуровневой модели.

7. Осуществлена процедура идентификации и верификации параметров физической модели на примере одноосного растяжения алюминиевого сплава 1420, полученные результаты удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными.

ОСНОВНЫЕ ПУБЛИКАЦИИ АВТОРА ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. Трусов П.В., Шарифуллина Э.Р., Швейкин А.И. Многоуровневая модель для описания пластического и сверхпластического деформирования поликристаллических материалов // Физическая мезомеханика. – 2019. – Т.22, №2. – С.5-23. **(ВАК)**

2. Шарифуллина Э.Р., Швейкин А.И., Трусов П.В. Обзор экспериментальных исследований структурной сверхпластичности: эволюция микроструктуры материалов и механизмы деформирования // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2018. – С.103-127. **(ВАК, Scopus)**

3. Швейкин А.И., Шарифуллина Э.Р., Трусов П.В., Пушкин Д.А. Об оценке чувствительности статистических многоуровневых моделей поликристаллических металлов к возмущениям параметров // Вычислительная меха-

ника сплошных сред – Computational continuum mechanics. – 2018. – Т. 11, № 2. – С.214-231. **(BAK)**

4. Shveykin A.I., Sharifullina E.R. Development of multilevel models based on crystal plasticity: description of grain boundary sliding and evolution of grain structure // Nanomechanics Science and Technology: An International Journal. – 2015. – Vol. 6. – Iss.4. – pp.281-298. **(Scopus)**

5. Швейкин А.И., Шарифуллина Э.Р. Анализ конститутивных соотношений для описания внутризеренного дислокационного скольжения в рамках двухуровневой упруговязкопластической модели ГЦК-поликристаллов // Вестник Тамбовского государственного университета. – 2013. – Т.18, №4. – С.1665-1666. **(BAK)**

6. Sharifullina E.R., Shveykin A.I., Trusov P.V. Multilevel model for description of material deformation under structural superplasticity conditions: modified kinetic equations // AIP Conference Proceedings. – 2018. – V.2051. – 020277. **(Web of Science, Scopus)**

7. Sharifullina E.R., Shveykin A.I., Trusov P.V. Multilevel model of polycrystalline materials: grain boundary sliding description// IOP Conference Series: Materials Science and Engineering.– 2017. – V.286. – 012026. **(Scopus)**

8. Trusov P., Sharifullina E., Shveykin A. Three-level modeling of fcc polycrystalline inelastic deformation: grain boundary sliding description// IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering. – 2015. – V.71. – 012081. **(Scopus)**

9. Trusov P.V., Shveykin A.I., Sharifullina E.R., Kondratev N.S. Model of polycrystalline inelastic deformation with grain boundary sliding description// Advanced Materials Research. – 2014. – Vol.1040. – pp.86-91. **(Scopus)**

10. Шарифуллина Э.Р., Трусов П.В., Швейкин А.И. «Реализация трехуровневой модели неупругого деформирования поликристаллов с описанием зернограницного скольжения» («Трехуровневая модель поликристалла»). – **Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2015663151 от 11.12.2015.**